

Kalibrierung eines DEM-Codes für werkstoffmechanische Anwendungen

Diplomarbeit

von

Youssef Aidi

Matrikelnummer: 004240441

vorgelegt am

04. September 2009

betreut durch

Dr.-Ing. Jan Blömer

Dipl.-Ing. Nils Mölders

In Zusammenarbeit mit:

Lehrstuhl für Energieanlagen und Energieprozesstechnik

Ruhr-Universität Bochum

Prof. Dr.-Ing. V. Scherer

Dr.-Ing. S. Wirtz

Eidesstattliche Versicherung

Ich versichere an Eides statt durch meine Unterschrift, dass ich die vorstehende Arbeit zum Thema »Kalibrierung eines DEM Codes für werkstoffmechanische Anwendungen« selbständig und ohne fremde Hilfe angefertigt und alle Stellen, die ich wörtlich oder annähernd wörtlich aus Veröffentlichungen entnommen habe, als solche kenntlich gemacht habe, sowie mich keiner anderen als der angegebenen Literatur oder sonstiger Hilfsmittel bedient habe. Die Arbeit hat in dieser oder ähnlicher Form noch keiner anderen Prüfungsbehörde vorgelegen.

Bochum, 04.09.2009

Youssef Aidi

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Stand der Technik	6
2.1	Werkstoffmechanische Grundlagen	6
2.1.1	Technische und wahre Größen	8
2.1.2	Zugversuch	10
2.1.3	Kenngrößen des Zugversuches (Werkstoffkennwerte)	12
2.2	Diskrete Elemente Methode	14
2.2.1	Grundlagen	15
2.2.2	Modellierung	16
2.3	Modellparameter	20
2.3.1	Elastische Eigenschaften	20
2.3.2	Dämpfung	21
2.3.3	Coulomb'sche Reibung	21
3	Versuchsobjekte	22
3.1	Zugproben für metallische Werkstoffe	23
3.2	Zugproben für Polymere	28
3.3	Proben für Dämpfungsversuche	32
4	Bereitstellung der Versuchsumgebung	33
4.1	Partikel-Partikel-Wechselwirkung	33
4.1.1	Erfassung von Wechselwirkungen	36
4.1.2	Setzen der Zugkräfte	39
4.2	Kraftsensor	40

4.3	Programmierung der Versuche	41
4.3.1	Setzen der Versuche	43
4.3.2	Setzen der Kraftsensoren	44
4.3.3	Setzen des Wegsensors	45
4.3.4	Graphische Ausgabe der Sensoren	45
5	Kalibrierung	47
5.1	Abschätzung der Parameter	48
5.1.1	Physikalischer Hintergrund	48
5.1.2	Startparameter	51
5.2	Relaxierung der Proben	54
5.3	Auswertung der Simulationen	59
5.3.1	Einfluss der Dämpfung	59
5.3.2	Einfluss der Coulomb'schen Reibung	64
5.3.3	Einfluss des Suchradius	67
5.3.4	Einfluss unterschiedlicher Zug- und Druckfeder	71
5.3.5	Einfluss der Plastizität	73
6	Fazit und Ausblick	74
A	Verwendete Formelzeichen	82
B	Relavante Routinen	85
B.1	Hinzufügen einer Wechselwirkung	86
B.2	Setzen eines Zugversuches	87
B.3	Setzen eines Kraftsensors	88
B.4	Durchführung der Kraftmessung	89
B.5	Körperdrehung	90
C	Initialisierungsdatei für die Einstellungen der Versuchsumgebung	91
D	SHELL-Skript zur Simulationssteuerung	93

Kapitel 1

Einleitung

Bei der Entwicklung mechanischer Komponenten im Maschinenbau ist die Untersuchung werkstoffmechanischer Eigenschaften der entworfenen Bauteile eine der wichtigsten Aufgaben, die ein Konstrukteur zu leisten hat. Dabei entscheidet das Zusammenspiel der Geometrie sowie des eingesetzten Werkstoffs über die mechanischen Eigenschaften dieses Bauteils. Erstere können verändert werden bis das gewünschte Ergebnis erzielt wird. Die Vielfalt der Gestaltungsszenarien bei verschiedenen Belastungsmöglichkeiten eines Bauteils sind mit großem Aufwand verbunden, um die bestmögliche Konstellation zu finden. Wie in jedem anderen Bereich der Technik, kommen Computer zum Einsatz, um dem Konstrukteur dabei zu helfen, seine konstruierten Bauteile zu optimieren. Mit Hilfe von Simulationstechniken können reproduzierbare Betriebszustände unter verschiedenen Rahmenbedingungen kosteneffizient und zeitsparend durchlaufen werden, was zu einer gezielten Optimierung der Parameter eines Bauteils und zu einer Vorhersage seines Verhaltens führt. Weiterhin können dieselben Simulationen das Verständnis des Werkstoffverhalten ermöglichen, sowie deren innere Vorgänge abbilden. Es sind verschiedene Simulationsansätze entwickelt worden, darunter auch einige Diskretisierungsverfahren.

- Finite Elemente Methode (FEM)
- Finite Volumen Methode (FVM)
- Randelementemethode (BEM)
- Gitterlose Verfahren
 - Diskrete Elemente Methode (DEM)
 - Klassische und quantenmechanische Molekulardynamik (MD)
 - Dissipative Partikel Dynamik (DPD)
 - Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)

Eines der verbreiteten und erprobten Verfahren ist die Finite Elemente Methode, womit Probleme aus verschiedenen Disziplinen der Mechanik, Strömungsmechanik, Thermomechanik, etc. behandelt werden können. Diese Flexibilität ist seinem numerischen Verfahren zu verdanken, das auf dem Lösen partieller, orts- bzw. zeitabhängiger Differentialgleichungssystemen beruht. Zunächst wird ein Gebiet in eine definierte Anzahl von endlichen (finiten) Elemente unterteilt, die sich mit einer bestimmten Anzahl von Parametern beschreiben lassen. Diese Parameter sind auch als Randbedingungen zu verstehen. Diese Teilgebiete bilden die sogenannten Knoten. Jedem dieser Knoten wird eine Interpolationsfunktion zugewiesen, die durch eine Linearkombination mit anderen Knoten ein geschlossenes System beschreiben kann. FEM ist ein etabliertes Werkzeug, um ein Kontinuum und elastische Werkstoffe zu simulieren. Beim Auftreten eines Risses oder eines Bruches stößt diese Methode an ihre Grenzen, da das Gleichungssystem für jede geometrische Änderung der Diskontinuität neu aufgestellt werden muss. FVM und BEM können nur bedingt das Durchdringen eines Festkörpers und die damit verbundene Abrasionserscheinungen simulieren. Deswegen kommen sie in der Festkörpermechanik relativ wenig zum Einsatz.

Eine Alternative zur klassischen kontinuumbasierten FEM stellt die DEM dar. Diese ist ein numerisches Verfahren, mit dem die Bewegung eines Mehrteilchensystems berechnet werden kann. Ursprünglich diente sie zu Berechnungen in der Molekulardynamik und findet mehr und mehr Anwendung im Maschinenbau sowie anderen Domänen der Technik. Es wird angenommen, dass ein Bauteil aus einer endlichen Zahl von Elementen besteht, die miteinander interagieren und dem Newton'schen Gesetz unterliegen. Die verschiedenen Wechselwirkungen zwischen einem Element und dessen Nachbarelementen werden aufsummiert und die Änderung der Geschwindigkeit und Position des Elementes innerhalb eines bestimmten Zeitschrittes durch geeignete Integrationsverfahren berechnet. Die Überlagerung aller Kräfte und Bewegungen der Diskreten Elemente simulieren dann das Verhalten des Bauteils. Mit dieser Methode ist allerdings ein hoher Berechnungsaufwand verbunden, wodurch die Simulation auf wenige Millionen Elemente beschränkt ist [24]. Dank der stetigen Entwicklung von leistungsfähigerer Hardware gewinnt die Diskrete Elemente Methode immer mehr an Bedeutung und findet in immer mehr Disziplinen Einsatz. Ein wichtiger Aspekt, der den Einsatz von DEM erschwert, ist die nötige Kalibrierung des Systems. Aktuell gibt es noch keine analytischen Methoden, um Werkstoffkennwerte in einem DEM Modell abzubilden, da die Wechselwirkungsparameter zwischen den Elementen sich nicht mehr unmittelbar aus den Stoffeigenschaften ermitteln lassen.

Fraunhofer UMSICHT untersucht das Versagensverhalten polymerer Werkstoffe, sowie das Verschleißverhalten metallischer Werkstoffe bei der Bearbeitung polymerer Werkstoffe. Im Rahmen dieser Untersuchung wird ein eigener DEM-Code – spezialisiert auf eben diese feststoffmechanischen Fragestellungen – entwickelt. Eine Basisversion dieses Codes, mit dem Körper beliebiger Geometrie aus Elementen aufgebaut werden und diese Körper miteinander in Wechselwirkungen gesetzt werden können, ist vorhanden. Als Elemente stehen Kugeln und Kugelcluster zur Verfügung. Die Wechselwirkung der diskreten Elemente untereinander erfolgt durch Federn, Reibelemente und Dämpfer.

Bisher wurden mit dem Modell nur Materialien mit willkürlichen Materialeigenschaften untersucht. Ziel dieser Arbeit ist eine Grundlage zu schaffen, die Eigenschaften realistischer Materialien abzubilden, d.h. die Mikroparameter und deren systematische Abhängigkeiten zu ermitteln.

In dieser Arbeit sollen folgende Tools genutzt werden:

- Programmiersprache: FORTRAN90; Intel *ifort* Compiler auf Linux Kernel
- Graphische Darstellung mit PG-Plot bzw. Povray und Animationen mit mencoder
- Diagramme in Gnuplot
- Dokumentation in \LaTeX

Kapitel 2

Stand der Technik

2.1 Werkstoffmechanische Grundlagen

In der Regel werden Maschinenbauteile mit verschiedenen Belastungsfällen beansprucht, wobei sie Zug-, Druck-, Biege- und Torsionskräfte übertragen. Das Material reagiert auf diese Belastungen mit einer elastischen, viskoelastischen oder plastischen Verformung. In der mechanischen Werkstoffprüfung werden diese Belastungsfälle an Proben nachgestellt. Gemessen wird der Kraftanstieg in Abhängigkeit von der Verformung. Durch Bezug der Kraft F auf eine Probenebene A wird die Normalspannung σ ermittelt:

$$\sigma = \frac{F}{A} \quad (2.1)$$

Der Begriff Spannung erlaubt dem Ingenieur, sich von geometrischen Randbedingungen freizumachen. So muss etwa ein doppelt so dicker Draht viermal so stark belastet werden um die gleiche mechanische Auswirkung (Dehnung, Bruch) zu erzielen. Es wird somit angestrebt, mechanische und geometrische Werkstoffkennwerte zu trennen. Wie aus Abb. 2.1 hervorgeht, sind die Spannungen im Zug- und Druckversuch homogen, im Biege- und Torsionsversuch inhomogen über dem Probenquerschnitt verteilt.

Der Bruch aus Gl.2.1 kann im Nenner und Zähler mit dem Weg erweitert werden. Dies führt dazu, dass eine mechanische Spannung auch einer Verformungsenergie pro Volumen entspricht.

$$\sigma = \frac{F \cdot s}{A \cdot s} = \frac{\text{Energie}}{\text{Volumen}} \quad (2.2)$$

Das Ziel der mechanischen Werkstoffprüfung liegt in der Ermittlung charakteristischer Werkstoffkennwerte, wie Festigkeit und Zähigkeit sowohl für die Herstellung als auch für

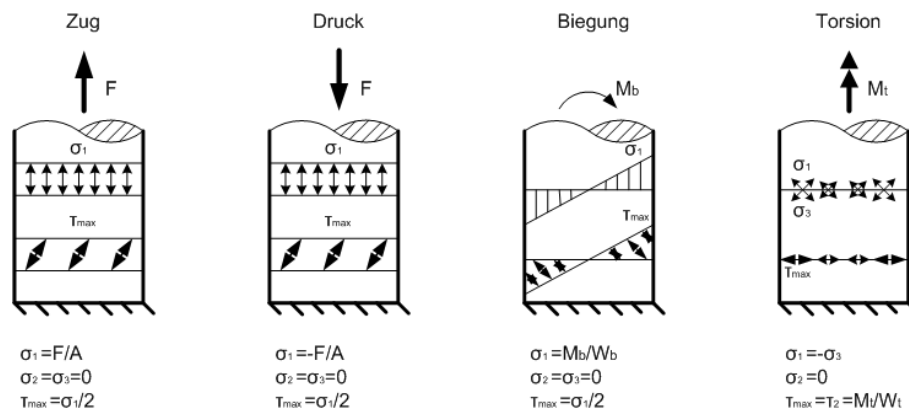


Abbildung 2.1: Grundarten der mechanischen Beanspruchung

die Auslegung von Bauteilen. Es hat sich gezeigt, dass die Kennwerte sowohl vom Werkstoff als auch von den Beanspruchungsbedingungen abhängen. Die allgemeine Erfahrung zeigt, dass ein harter Werkstoff meist spröde reagiert und ein weicher Werkstoff zäh. Dagegen gehört die Auswirkung der Beanspruchungsbedingungen auf die Kennwerte eines gegebenen Werkstoffes nicht zum allgemeinen Erfahrungsschatz. Streng genommen, gibt es keine Festigkeit oder Zähigkeit eines Werkstoffes, lediglich nur mechanische Kennwerte, die von den Beanspruchungsbedingungen abhängen. Diese sind :

- Temperatur
- Beanspruchungsgeschwindigkeit
- Spannungszustand

Die beiden ersten Prüfbedingungen hängen zusammen. Denn je höher die Temperatur und je länger die Zeit, umso größer fällt die thermische Aktivierung von Versetzungen aus, deren Gleitung in Metallen eine plastische Verformung in dicht mit Atomen besetzten Kristallebenen hervorruft. Bei relativ niedrigeren Temperaturen versagt der Werkstoff durch Spaltung von Kristallebenen, die weniger dicht mit Atomen besetzt sind.

Die dritte Prüfbedingung bezieht sich auf die mehrachsige Beanspruchung eines Bauteiles. So ist z.B. in einem zylindrischen Druckbehälter die Längsspannung σ_2 halb so groß wie die Umfangsspannung σ_1 und deutlich größer als die radiale Druckspannung σ_3 . Diese Hauptnormalspannungen lassen sich zu einer hydrostatischen Normalspannung zusammenfassen.

$$\sigma_h = \frac{1}{3}(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) \quad (2.3)$$

Schubspannungen ergeben sich aus Normalspannungsdifferenzen und werden u.a. in einer Vergleichsspannung nach von Mises zusammengefasst.

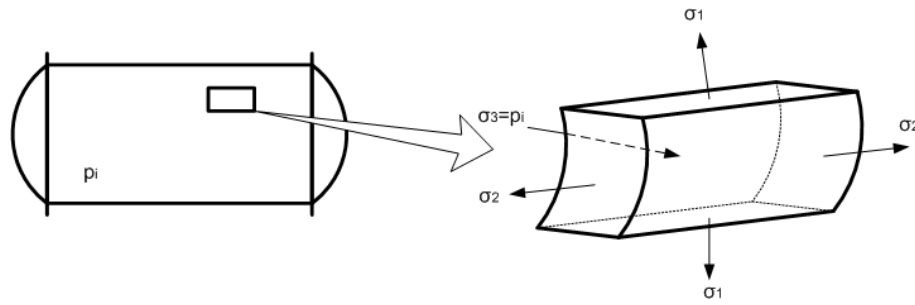


Abbildung 2.2: Spannungen am dünnwandigen Rohr

$$\sigma_v = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{[(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2]} \quad (2.4)$$

Normalspannungen begünstigen sprödes Versagen durch Spaltung, Schubspannungen fördern zähes Verhalten durch Gleiten. Das Verhältnis σ_h/σ_v wird als Mehrachsighitsgrad bezeichnet und stellt die dritte Beanspruchungs- bzw. Prüfbedingung dar. Bereits durch eine Kerbe wird die einachsige zur mehrachsigen beanspruchten Zugprobe. Der Mehrachsighitsgrad steigt dabei mit der Kerbschärfe. Gekerbte Bauteile tendieren daher zu spröderem Verhalten.

Im Zugversuch sollen wichtige Werkstoffkennwerte für die Auslegung und für die Verarbeitung gemessen werden. Anhand des Biegeversuches wird der Einfluss der Prüfbedingungen veranschaulicht. Während der Werkstoff in diesen Versuchen einmal bis zum Bruch belastet wird, erfolgt im Schwingversuch die Belastung oder Verformung auf niedrigem Niveau zyklisch über längere Zeit. Der Schwingbruch stellt die häufigste Versagensart von Maschinenbauteilen dar.

2.1.1 Technische und wahre Größen

Bei hohen Verformungen ist es wichtig, zwischen technischen und wahren Größen zu unterscheiden. Diese sind durchaus bei viskoelastischen Werkstoffen interessant. Die technischen Werte für Spannung und Dehnung werden auf die Ausgangsgeometrie der Probe bezogen. Für eine Zugprobe wären dies der Ausgangsquerschnitt A_0 und die Ausgangslänge l_0 . Für die technische Spannung und die technische Dehnung ε_0 ergibt sich:

$$\sigma_0 = \frac{F}{A_0} \quad (2.5)$$

$$\varepsilon_0 = \frac{\Delta l}{l_0} \quad (2.6)$$

Mit diesen Definitionen für ε_0 und σ_0 wird üblicherweise gearbeitet. Bei hohen Verformungen führt dies jedoch zu Problemen. Im Falle eines Polymers, bei dem Dehnungen bis zu

1000 Prozent möglich sind, wird der Querschnitt signifikant kleiner als der ursprünglich. Deshalb wird die wahre Dehnung eingeführt (Gl. 2.7), die immer auf die aktuelle wahre Längenänderung und die jeweils aktuelle Länge bezogen wird.

$$\partial\varepsilon = \frac{\partial l}{l} \quad (2.7)$$

Nach der Integration:

$$\varepsilon = \int_0^\varepsilon \partial\varepsilon = \int_{l_0}^l \frac{\partial l}{l} = \ln \frac{l}{l_0} = \ln\left(\frac{l_0 + \Delta l}{l_0}\right) = \ln(1 + \varepsilon_0) \quad (2.8)$$

Per Definition gilt für kleine x die Näherung $\ln(1 + x) = x$. Deshalb wird für kleine (elastische) Dehnungen kein wesentlicher Unterschied zwischen der technischen und wahren Dehnung erwartet. Bei Dehnungen von mehr als 10 Prozent gibt es deutliche Unterschiede.

Jetzt soll eine Beziehung für die wahre Spannung abgeleitet werden:

$$\sigma = \frac{F}{A} = \frac{F}{A_0} \cdot \frac{A_0}{A} \quad (2.9)$$

Es wird angenommen, dass das Volumen V bei der Verformung konstant bleibt. Dies gilt aber für einige Werkstoffe nicht:

$$V = A_0 \cdot l_0 = A \cdot l \implies \frac{A_0}{A} = \frac{l}{l_0} \quad (2.10)$$

Einsetzen in Gl. 2.9 liefert:

$$\sigma = \sigma_0 \cdot \frac{l}{l_0} = \sigma_0 \cdot \frac{l_0 + \Delta l}{l_0} = \sigma_0 \cdot (1 + \varepsilon_0) = \sigma_0 \cdot \exp \varepsilon \quad (2.11)$$

Mit Gl.2.8 und Gl. 2.11 können technische und wahre Größen für Spannungen und Dehnungen ineinander umgerechnet werden.

2.1.2 Zugversuch

Der Zugversuch ist einer der wichtigsten Versuche in der mechanischen Werkstoffprüfung, da unmittelbar die wichtigste Kenngröße eines Werkstoffes, das E-Modul, ermittelt werden kann. Es dient zur Bewertung der Festigkeits- und Verformungseigenschaften von Werkstoffen unter momentenfreier, monoton ansteigender Zugbelastung. Das Ergebnis des Zugversuchs sind Kennwerte der Festigkeit und des Formänderungsvermögens eines Werkstoffes, die die Grundlage für eine sichere Bauteilauslegung bilden (Abschnitt 2.1.3).

Die Zugversuche sind durch Vorschriften genormt, die neben den Vorgaben zur Versuchsdurchführung und Versuchsauswertung auch Definitionen der Werkstoffkenngrößen und Vorschriften zu der zu verwendenden Probengeometrie enthalten. Um die den Werkstoffaufbau charakterisierenden inherenten Werkstoffeigenschaften zu ermitteln und die erforderliche Reproduzierbarkeit und Vergleichbarkeit der Messergebnisse verschiedener Prüfstellen zu sichern, wird der Zugversuch an ungekerbten, d.h. glatten Werkstoffproben einfacher Geometrie (homogener, einachsiger Spannungszustand) unter definierten Beanspruchungsbedingungen (Verformungsgeschwindigkeit, Umgebungsbedingungen) durchgeführt.

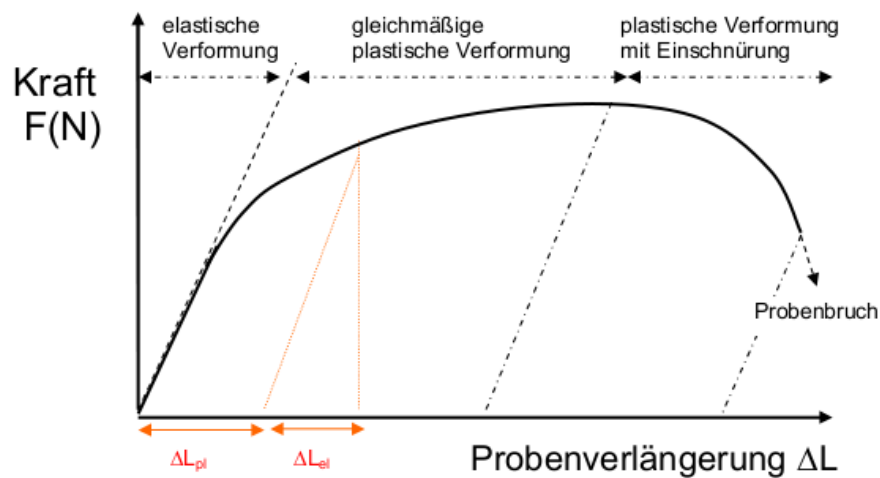


Abbildung 2.3: Kraft-Verlängerungsdiagramm, schematisch

Ergebnis des Zugversuchs sind das Spannungs-Dehnungsdiagramm (=Verformungskurve des Werkstoffes) und die daraus entnommenen Werkstoffkennwerte. Zu dessen Ermittlung wird mit geeigneten Prüfmaschinen an Probestäben, die mit zunehmender Verformung sich einstellende Prüfkraft gemessen. Aus dem resultierenden Kraft-Verlängerungsdiagramm wird dann ein weitgehend von der Probengröße unabhängiges Spannungs-Dehnungsdiagramm berechnet. Dem Spannungs-Dehnungsdiagramm werden abschließend die für den untersuchten Werkstoff charakteristischen Werkstoffkennwerte entnommen.

Die allgemeine Form des Spannungs-Dehnungsdiagramms wird durch die Grundprozesse bestimmt:

- Elastische Dehnung des Atomgitters (=Verschiebung der Atome aus ihrer Gleichgewichtslage)
- Plastische Verformung durch Abscheren von Ebenen des Atomgitters über Versetzungsbewegungen
- Ggf. Aufbrechen von Atombindungen (Spaltbruch) am Ende des Zugversuchs (nur in hochfesten spröden Werkstoffen)

Die spezielle Form des Spannungs-Dehnungsdiagramms bei metallischen Werkstoffen wird bestimmt durch:

- Stärke der Atombindungen und Anordnung der Atome im Kristallgitter (E-Modul)
- Realstruktur des Werkstoffes (Gitterfehler, Phasen, Gefüge) und der daraus resultierenden Beweglichkeit von Gitterfehlern (Festigkeit)
- Wanderung und verformungsbedingte Vermehrung der Gitterfehler, v.a. der Versetzungen (plastische Verformung, Verfestigung)

Hingegen wird die spezielle Form des Spannungs-Dehnungsdiagramm bei Polymeren durch die Eigenschaften und Aufbau deren Molekülen geprägt.

Gebäuchliche Probenformen sind Rund- oder Flachproben. Um mögliche Einflüsse der Probengeometrie auf das Prüfergebnis auszuschließen, wird die Verwendung sogenannter *Proportionalstäbe* empfohlen. Bei diesen wird ein festes Verhältnis zwischen der Ausgangsmesslänge l_0 und dem Anfangsquerschnitt A_0 gefordert:

$$l_0 = k \cdot \sqrt{A_0} \quad (2.12)$$

- kurzer Prop.-Stab : $k = 5\sqrt{4/\pi} = 5,65 \Rightarrow l_0 = 5d_0$ für Rundproben
- kurzer Prop.-Stab : $k = 10\sqrt{4/\pi} = 11,3 \Rightarrow l_0 = 10d_0$ für Rundproben

Bei der Versuchsdurchführung wird der Prüfstab mit konstanter Verformungsgeschwindigkeit einachsrig bis zum Bruch gedehnt. Dabei wird die Zugkraft F als Funktion der Längenänderung $\Delta l = l - l_0$ registriert. Die Längenänderung der Probe wird direkt durch Ansetzwegaufnehmer gemessen oder aus dem Querhauptweg abgeleitet. Der Zusammenhang Kraft-Längenänderung wird analog aufgezeichnet und/oder digital gespeichert.

Zugprüfmaschinen gibt es in vielfältiger Bauart:

- Mechanischer oder hydraulischer Antrieb mit vorwählbarer Abzugsgeschwindigkeiten des Querhauptweges oder Regelung der Kolbenbewegung in hydraulischen Zylindern

- Probeneinspannungen erfolgen mechanisch (z.B. Keilbackenklemmen, Gewindekopfhalterung, Stift/Bolzenhalterung) oder hydraulisch

Messung von Kraft und Weg (Längenänderung) erfolgen mit Hilfe von

- Kraftmessdosen, zumeist auf Basis von Dehnmessstreifen (DMS)
- Ermittlung der Längenänderung der Probe aus dem Verformungsweg des Querschnittes
- Ansetzdehnungsmesswandler auf DMS-Basis für direkte Verformungsmessung auf der Probe, ggf. auch induktive, kapazitive Wegaufnehmer

2.1.3 Kenngrößen des Zugversuches (Werkstoffkennwerte)

Kenngrößen des elastischen Materialverhaltens (Materialsteifigkeit)

Bei kleinen Dehnungen verformt sich der Prüfkörper rein elastisch entsprechend dem *Hook'schen Gesetz* $\sigma = E \cdot \varepsilon$. Der Anstieg der elastischen Geraden wird demnach durch das Elastizitätsmodul des Materials bestimmt und kann aus diesem ermittelt werden. Die Ermittlung des E-Moduls im Zugversuch ist jedoch mit größeren Messunsicherheiten behaftet. Eine E-Modul-Messung mit höchster Präzision wird über die Messung von Resonanzschwingfrequenzen von Probestäben oder der Ausbreitungsgeschwindigkeit von Ultraschallwellen durchgeführt.

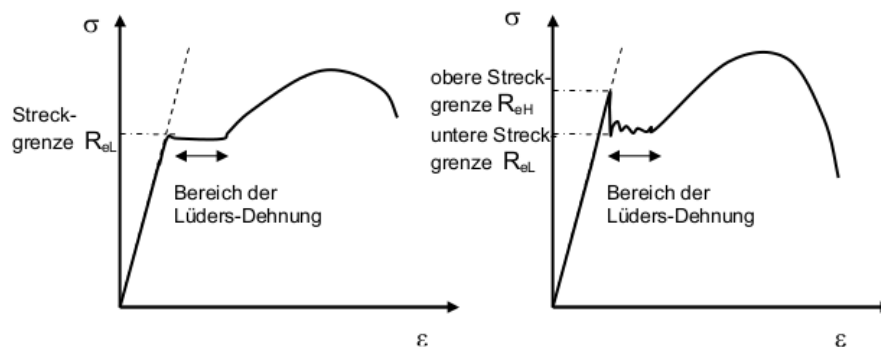


Abbildung 2.4: Spannungs-Dehnungskurve eines duktilen Werkstoffes mit (links: ausgeprägter Streckgrenze, Rechts: mit Streckgrenzeneffekt)

Festigkeitskenngrößen

Überschreitet die Spannung die sogenannte Elastizitätsgrenze, kommt zur elastischen (reversiblen) eine plastische (bleibende) Dehnung hinzu. Verläuft dieser Übergang stetig, so wird eine plastische Dehngrenze bestimmt. Üblicherweise wird hierfür die 0,2%-Dehngrenze

$R_{p0,2}$ benutzt. Hierbei wird durch Parallelverschiebung der elastischen Geraden die Spannung bestimmt, bei der sich eine plastische Dehnung von 0,2% ergibt. Die plastische Verformung ist zunächst durch einen weiteren Anstieg der technischen Spannung gekennzeichnet, d.h. der Formänderungswiderstand bezogen auf den Anfangsquerschnitt nimmt mit fortschreitender Dehnung zu (Verfestigung) bis hin zu einem maximalen Wert, der Zugfestigkeit R_m .

- Spannung bei Beginn plastischer Verformung:
 - Fließgrenze für vorgegebene plastische Dehnung $R_{p0,2}, (R_{p0,01}, R_{p1})$
 - Elastizitätsgrenze, untere und obere Streckgrenze $R_e, (R_{eL}, R_{eH})$
- Spannung im Maximum der Verformungskurve (Beginn der Einschnürung):
 - Zugfestigkeit $R_m = F_m/A_0$

Verformbarkeitskenngrößen

Bei Erreichen des Maximums der technischen Spannungs-Dehnungskurve beginnt sich der Prüfquerschnitt einzuschnüren. Der bis dahin erreichte plastische Verformungsanteil heißt Gleichmaßdehnung S_g . Bei weiterer Verlängerung über die Gleichmaßdehnung hinaus nimmt die von der Probe ertragbare Kraft aufgrund der Probeneinschnürung ab, bis es schließlich zum Bruch kommt. Da die Bruchdehnung S von der Geometrie und Ausdehnung der Einschnürzone stark beeinflusst wird, wird als Kenngröße für das Formänderungsvermögen die Brucheinschnürung Z bevorzugt. Sie wird berechnet aus der Anfangs- und der Bruchquerschnittsfläche.

- Dehnung bei beginnender Einschnürung (Spannungsmaximum)
 - Gleichmaßdehnung $S_g = \varepsilon_g = \Delta l_{pm}/l_0$
- Dehnung nach Probenbruch
 - Bruchdehnung $S = \Delta l_r/l_0$
 - Brucheinschnürung $Z = \delta A/A_0$

Weitere Kenngrößen:

- Arbeitsvermögen U
- Streckgrenzenverhältnis $R_{p0,2}/R_m$
- Verfestigungsexponent n
- Verfestigung $d\sigma/d\varepsilon$

2.2 Diskrete Elemente Methode

Bei der Simulation von Feldproblemen, wie mechanische und thermische Belastungsfälle eines Bauteils, hat sich die ausgereifte Finite Elemente Methode durchgesetzt. Allerdings ist sie für die Behandlung von Diskontinua nicht geeignet. Dadurch erweist sich die Beschreibung von Abrasion und Bruchphänomenen, wegen der erforderlichen Neuvernetzung des Modells sowie der angepassten Änderung der Konfigurationsparameter als sehr schwierig. Zum Einsatz kommt deswegen die von der Molekulardynamik und in der Schüttgutmechanik angewandte Diskrete Elemente Methode [8, 9].

Ein großer Teil der verfahrenstechnischen Nahrungsmittel-, Rohstoff- und chemischen Industrie verarbeitet granulare Materialien wie Zucker, Getreide, Sand oder Dünger. Ein Mehrkörpersystem wird als granulares Medium bezeichnet, wenn seine Gesamtabmessungen groß sind im Verhältnis zu den Abmessungen seiner einzelnen Bestandteile. Diese Medien stellen immer mehr Anforderungen an deren theoretischen Beschreibung, um ihre Verarbeitung besser gestalten zu können. Sie unterscheiden sich jedoch vom Kontinuum in flüssiger, fester oder gasförmiger Phase, da sie spezielle Eigenschaften aufweisen [25].

Um das Verhalten granularer Materialien besser verstehen zu können, müssen innere Abläufe im Material, wie Geschwindigkeiten und herrschende Kräfte aufgezeigt werden, die schwer experimentell ermittelbar sind. DEM ist in der Lage diese Größen darzustellen selbst in einem diskontinuierlichen Zustand. Dabei kommt es auf die Berechnung von sowohl translatorischen als auch rotatorischen Bewegungen einzelner Elemente in einem Gesamtsystem, sowie den daraus resultierenden Wechselwirkungen in einem definierten Zeitraum über eine systemspezifische Schrittweite an [13].

Der Einsatz von DEM beschränkt sich nicht nur auf granulare Materialien, sondern findet langsam Einsatz in der Festkörpermechanik. Potapov [19], Kun [11] und Herrmann [13] haben durch eine mesoskopische Betrachtungsweise gezeigt, dass Bruchphänomene bei Zerkleinerungsvorgängen beschrieben werden können. Slack seinerseits hat DEM benutzt, um Materialeinschlüsse in heterogenen Werkstoffen zu beschreiben [23]. Zeng und Kumar benutzten das gleiche Verfahren zur Beschreibung homogener Werkstoffe und Komposite [10, 28].

Zur Zeit konzentriert sich der Anwendungsbereich auf Bruchversagen und Zerkleinerung von Baustoffen wie Beton oder Gestein [1, 16, 20], oder Prallzerkleinerung mittels entsprechender Maschinen oder Werkzeugen [19]. Kommerzielle Software, welche das Verhalten von weichen Werkstoffe u.a. von Polymeren simulieren kann, ist schon vorhanden [12].

Basierend auf DEM ist es nun möglich, topologisches Verhalten verschiedener Materialpaarungen zu beschreiben. Dadurch ist die Simulation von Abrasion und Erosionsphänomenen mit akzeptablen Ergebnissen möglich [26].

2.2.1 Grundlagen

Mittels statistischer Methoden wie der Monte-Carlo-Simulation (MCS) oder deterministische Methoden wie der Molekulardynamik (MD) können zeitabhängige physikalische Vorgänge beschrieben werden. Die beiden Methoden finden dort Anwendung, wo die Dynamik zwischen Teilchen in der Größenordnung von Atomen und Molekülen bestimmt werden soll. Deswegen wird die MD in verschiedenen Bereichen der Chemie, Biologie und der Physik eingesetzt. In diesen Dimensionen herrschen intermolekulare Wechselwirkungen wie Coulomb- und van-der-Waals-Kräfte.

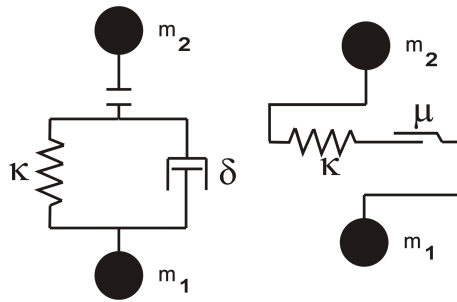


Abbildung 2.5: Rheologische Modelle

Ausgehend von der MD haben Cundall und Strack in den 70er Jahren die Diskrete Elemente Methode abgeleitet[2], um Probleme der Felsmechanik zu lösen. Diese soll zum Einen endliche Verschiebungen und Rotationen diskreter Körper, einschließlich ihrer vollständigen Trennung voneinander, zulassen und zum Anderen automatisch neue Kontakte erkennen. Durch rheologische Modelle waren sie in der Lage, die spezielle Mechanik der granularen Materialien, wie Reibung und elastische Stöße zwischen Körpern, abzubilden (Abb. 2.5). Grundgedanke dabei ist die Annahme, dass für alle N diskreten Elemente eines Gesamtsystems die Newton'schen Bewegungsgleichungen für jeden Freiheitsgrad gelöst werden können (Gl. 2.13). Dieser Ansatz genügt sowohl dem zweidimensionalen als auch dem dreidimensionalen Fall.

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{x}_i}{dt^2} = \sum_{j=1}^N \mathbf{F}_{ij} + m_i g \quad (2.13)$$

$$J_i \frac{d^2 \varphi_i}{dt^2} = \sum_{j=1}^N \mathbf{M}_{ij} \quad (2.14)$$

Es handelt sich hier um Gleichungen zweiter Ordnung, wobei m die Masse, J das Trägheitstensor, $d^2 \mathbf{x}_i / dt^2$ die Beschleunigung, $d^2 \varphi_i / dt^2$ die Winkelbeschleunigung, \mathbf{F} und \mathbf{M} die äußeren Kräfte und Drehmomente sind. Diese können leicht zu einem Gleichungssystem erster Ordnung überführt werden, um ihre Lösung einfacher zu gestalten. Dies gelingt mit der Einführung der Geschwindigkeit \mathbf{v} :

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_{j=1}^N \mathbf{F}_{ij} + m_i \mathbf{g} \quad (2.15)$$

$$\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \mathbf{v}_i \quad (2.16)$$

Das weitere Vorgehen besteht darin, dieses Gleichungssystem mit einem geeigneten numerischen Verfahren durch zeitliche Integration beider Gleichungen 2.13 und 2.14 zu lösen.

Es bieten sich verschiedene Integrationsverfahren an, die sich hinsichtlich der Genauigkeit und dem Berechnungsaufwand unterscheiden. Es gibt explizite oder implizite Einschrittverfahren mit optionaler Schrittweitenregulierung wie *Runge-Kutta* oder *Leap-Frog* Methoden [7]. Abweichend davon existieren Mehrschrittverfahren, wie *Gear-Prediktor-Korrektor* Integratoren, wo die Berechnung des nächsten Zeitschrittes unter Berücksichtigung der zurückliegenden bereits berechneten Punkte [22] durchgeführt wird.

Auf der rechten Seite der Gl. 2.15 steht eine Kraft \mathbf{F} , die unterschiedliche Kräfte zusammenfassen kann, die je nach Material oder Dimensionen berücksichtigt oder vernachlässigt werden können. Tabelle 2.1 zeigt die relevanten Kräftetypen, die bei der Simulation von Werkstoffen betrachtet werden können:

Krafttyp	Effekt
Elektrische Kräfte	Coulombsche Kraft, Kondensatoreffekt
Magnetische Kräfte	Lorentzkraft
Molekulare Kräfte	Adhäsion
Reibungskräfte	Gleitreibung, Strömungswiderstand
Stoßkräfte	Elastizität

Tabelle 2.1: Systematisierung der Krafttypen und deren Effekte

2.2.2 Modellierung

Im Rahmen der Kontinuumsmechanik können Kontaktprobleme detailliert behandelt werden. Für einfache Geometrien wie Kugel können die damit verbundenen Differentialgleichungen analytisch gelöst werden [5]. Im Falle komplexer Probleme können numerische Methoden u.a. Finite Element Analysis (FEA) in Betracht gezogen werden, um einen detaillierten Einblick in die zeitliche Entwicklung der Spannungen und Dehnungen in einem definierten Volumen oder Fläche zu ermöglichen. Nachteilig dabei ist, dass diese Methode viel Zeit in Anspruch nimmt, um die Gleichungen zu ermitteln, die zu den Kräften führen, um die Bewegungsgleichung zweier miteinander interagierender Partikel zu lösen. Da DEM auf Objekte angewandt werden soll, die aus sehr vielen Elementen bestehen, reichen

die Rechenkapazitäten nicht mehr aus. Ein Alternativmodell ist deswegen erforderlich, um die Wechselwirkungen zweier Partikeln zu ermitteln. In der Regel werden Partikel als starr angesehen, die sich allerdings während einer Kollision überlappen können. Die wirkende Kraft kann aus dieser Überlappung abgeleitet werden.

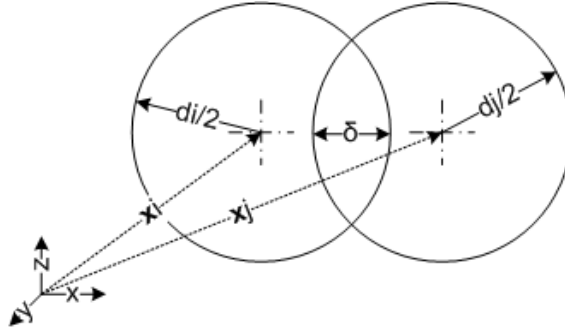


Abbildung 2.6: Überlappung zweier Kugелеlemente

In normaler Richtung wird die Überlappung δ zweier Kugелеlemente (Abb. 2.6) folgendermaßen angegeben:

$$\delta = \frac{1}{2}(d_i + d_j) - (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \cdot \mathbf{n} \quad (2.17)$$

Wobei d_i, d_j die Durchmesser und $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j$ die jeweiligen Ortsvektoren sind, multipliziert mit dem normalen Vektor \mathbf{n} , der die beiden Zentren der Kugeln i und j verbindet.

$$\mathbf{n} = (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) / |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j| \quad (2.18)$$

Die Normalgeschwindigkeit des Kontaktpunktes lässt sich aus den absoluten Geschwindigkeitsvektoren ermitteln:

$$\mathbf{v}^n = -[(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \cdot \mathbf{n}] \mathbf{n} \quad (2.19)$$

Aus der ermittelten Überlappung (Gl.2.17) und Normalgeschwindigkeit (Gl.2.19) kann ein einfaches Feder-Dämpfer Modell definiert werden, das die Wechselwirkung zwischen den beiden Partikeln beschreibt. Das Modell besteht aus einem elastisch repulsiven und einem dissipativen Anteil:

$$\mathbf{F}^n = \mathbf{F}_{el}^n + \mathbf{F}_{diss}^n = k^n \delta \mathbf{n} + \gamma^n \mathbf{v}^n \quad (2.20)$$

Wobei k^n die Federsteifigkeit des Federelementes und γ^n den Dämpfungskoeffizient darstellen. Ein Kraftmodell nach (Gl. 2.20) führt zu einer konstanten Rate für die Rückstellkraft, sowie einer konstanten Kollisionszeit, wo beide von der normalen Anfangsgeschwindigkeit v_0^n unabhängig sind. Ein solches Verhalten ist aber physikalisch nicht realistisch. Experimente haben gezeigt, dass beide Größen mit zunehmender Anfangsgeschwindigkeit abnehmen [21]. Bei einer quasistatischen Beanspruchung ist jedoch dieses Modell zu empfehlen, da der Einfluss der Anfangsgeschwindigkeit vernachlässigbar ist. Beide Koeffizienten k^n und γ^n sind reine empirische Größen, da es noch kein analytisches Verfahren gibt, um sie aus den Materialeigenschaften ableiten zu können und erfordern somit eine Kalibrierung. In tangentialer Richtung kann die Tangentialgeschwindigkeit \mathbf{v}^t ebenso aus der Relativgeschwindigkeit beider Partikel ermittelt werden zu:

$$\mathbf{v}^t = \mathbf{v}_{ij} - (\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} \quad (2.21)$$

Die Relativgeschwindigkeit \mathbf{v}_{ij} ist gegeben durch

$$\mathbf{v}_{ij} = (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) - \frac{1}{2}(\omega_i d_i + \omega_j d_j) \times \mathbf{n} \quad (2.22)$$

wo ω_i, ω_j die Winkelgeschwindigkeiten der Partikel sind. Ähnlich wie der Normale Einheitsvektor \mathbf{n} , kann ein tangentialer Einheitsvektor $\mathbf{t} = \mathbf{v}^t / |\mathbf{v}^t|$ aus der Tangentialgeschwindigkeit abgeleitet werden. Für den Kollisionspunkt kann eine Tangentialkoordinate ξ eingeführt werden, die die relative Verschiebung zweier Punkte der kollidierenden Partikel, die hauptsächlich in Kontakt sind.

$$\xi = \left[\int_{t_0}^{t_f} \mathbf{v}^t(f') dt' \right] \cdot \mathbf{t} \quad (2.23)$$

Die tangentielle Kraft kann somit berechnet werden:

$$\mathbf{F}^t = -\min(k^t \xi, \mu_C |\mathbf{F}^n|) \xi / |\xi| \quad (2.24)$$

Wobei k^t die Federsteifigkeit und μ_C der Coulomb'sche Reibungskoeffizient ist. Ein solches Modell Gl.2.24 wurde zum ersten mal von Cundall und Stark eingeführt [2]. Das Modell kann als eine lineare Feder betrachtet werden, die durch Reibung eingeschränkt wird. Bei einem Kontakt wird eine Feder zwischen den beteiligten Partikel gesetzt, die im Laufe der Zeit entweder gedehnt oder gestaucht wird. Durch das Tangentialkraft-Modell in Gl.2.24 können Partikel ihre Tangentialgeschwindigkeit während des Kontaktes beibehalten. Dies

wird durch zusätzliche Experimente bestätigt [6, 3]. Maio [14] hat gezeigt, dass sogar detaillierte Kollisionseigenschaften mit hoher Genauigkeit definiert werden können.

Die Tangential-Federsteifigkeit k^t kann analog zu dem elastischen Fall [15] auch für den viskoelastischen Fall [6] abgeleitet werden:

$$k^t = \kappa m \frac{\pi^2}{(t^n)^2} \quad (2.25)$$

Wobei κ der Quotient der tangentialen zu der normalen Steifigkeit und t^n die Kollisionsdauer ist. Wie ersichtlich wird, ist das Modell in der (Gl. 2.24) stark von κ abhängig. Dieser kann aus den mechanischen Eigenschaften der beiden beteiligten Partikel abgeleitet werden:

$$\kappa = \frac{[(1 - v_i)/G_i] + [(1 - v_j)/G_j]}{[(1 - 0.5v_i)/G_i] + [(1 - 0.5v_j)/G_j]} \quad (2.26)$$

mit der Querkontraktionszahl v und dem Schermodul G der beiden Partikel i und j . Die Kollisionsdauer kann aus dem einfachen Normalkraft-Modell (Gl.2.20) analytisch abgeleitet werden:

$$t^n = \pi \left[\frac{k^n}{m} - \left(\frac{\gamma^n}{2m} \right)^2 \right]^{-1/2} \quad (2.27)$$

2.3 Modellparameter

Anhand des Kontaktmodells, das oben eingeführt wurde, können die spezifischen Materialeigenschaften des zu simulierenden Werkstoffes berücksichtigt werden. Die Kontaktgesetze können die verschiedenen physikalischen Gesetze durch verschiedenen Parameter beschreiben. Wie realitätsnah die Simulation werden kann, hängt stark von der Wahl dieser Parameter ab. Daher ist eine Kalibrierung dieser Parameter erforderlich, in dem sie mit experimentellen Daten verglichen werden. In den folgenden Abschnitten werden die wichtigsten Kontaktgesetze der DEM-Simulation mit ihren entsprechenden Parametern aufgeführt, sowie die Bedeutung in der Simulation und die Kalibrierungsmöglichkeiten erläutert.

2.3.1 Elastische Eigenschaften

Im einfachsten Fall können die elastischen Verformungen an einem Kontakt zweier Partikel aus dem einfachen linearen Federgesetz ermittelt werden.

$$F_{el}^n = k^n \delta \mathbf{n} \quad (2.28)$$

Es bietet sich zusätzlich die Möglichkeit für sphärischen Partikel das nicht-lineare Gesetz der Hertz'schen Pressung an.

$$p_{max} = \frac{1}{\zeta \cdot \eta} \cdot \sqrt[3]{\frac{3 \cdot F \cdot E \cdot (\sum \chi)^2}{8\pi^3(1 - \nu^2)^2}} \quad (2.29)$$

Wobei

F : Kraft zwischen den Partikeln

E : E-Modul

ν : Querkontraktionszahl

ζ, η : Beiwerte nach Hertz für die Berührung gekrümmter Oberflächen

χ : Krümmung

p_{max} : Hertz'sche Pressung

Da üblicherweise die Partikel als Kugel angenommen werden, kann das Elastizitätsmodul des Partikelmaterials direkt verwendet werden. Sollen kompliziertere Realpartikel durch zusammengesetzte Kugeln abgebildet werden, müssen die Kontaktsteifigkeiten anhand eines Modellversuchs kalibriert werden. Dabei wird die mikroskopische Kontaktsteifigkeit solange variiert, bis die makroskopischen Steifigkeiten aus Experiment und Simulation übereinstimmen.

2.3.2 Dämpfung

Bei den in der Simulation verwendeten Partikelgrößen ist eine globale Dämpfung durch ein umgebendes Medium (Luft) nicht relevant. Essentiell ist jedoch die Kontaktdämpfung F_{Diss}^n , die im Allgemeinen geschwindigkeitsabhängig und zum Teil auch verformungsabhängig modelliert wird. Diese tritt nur dann in normaler Richtung auf, wenn Kontakt zwischen den Partikeln besteht d.h. $\delta > 0$ (Gl.2.17):

$$\mathbf{F}_{diss}^n = \gamma^n \mathbf{v}^n \quad (2.30)$$

Bis auf die Messung der Rücksprunghöhe realer Kugeln sind keine experimentellen Verfahren bekannt, anhand derer sich die Kontaktdämpfung kalibrieren ließe. Praktisch werden möglichst hohe Dämpfungen gewählt, wobei jedoch die Obergrenze mit der Kontaktsteifigkeit ansteigt.

2.3.3 Coulomb'sche Reibung

Nach Gl. 2.24 besteht die Tangentialkraft aus zwei Anteilen. Einem elastischen Anteil beschrieben durch die Tangentialfedersteifigkeit k^t und einem dissipativen Anteil durch die Coulomb'sche Reibung μ , wie das rheologische Modell in Abb. 2.5 zeigt. Der von Mölders [17] entwickelte Code behandelt nur den dissipativen Anteil wo die Tangentialkraft folgendermaßen definiert ist:

$$\mathbf{F}^t = -\min[0, (\mu_s, \mu_d)|\mathbf{F}^n|] \xi / |\xi| \quad (2.31)$$

Wobei μ_s die Haftreibung und μ_d die Gleitreibung ist.

Somit kann der Coulomb'sche Reibungskoeffizient die innere Reibung eines Werkstoffes beschreiben.

Kapitel 3

Versuchsobjekte

Um die Durchführung von Simulationen mittels vorhandener Modelle flexibler zu gestalten, ist die Bereitstellung von verschiedenen Manipulationsroutinen für die Modelle erwünscht. Dadurch entfällt die Neuerstellung neuer Modelle, die viel Zeit in Anspruch nimmt. In der Arbeit von Mölders [17] wird die Herstellung von DEM-Modellen erläutert. Diese Modelle entstehen durch Schütten von Kugeln mit um 5% abweichenden Durchmessern in eine, aus einer variablen Anzahl undruchdringlicher Wände erstellten Geometrie (Abb.3.1). Beim Schütten bekommen die Kugeln zufällige Startgeschwindigkeiten in zufälligen Richtungen. Treffen die Kugeln auf die Wandelemente, werden sie abgestoßen und es kommt zu einer chaotischen Anordnung der einzelnen Elemente, sowie einer hohen Packungsdichte mit nur minimalen Fehlstellen. Der Füllvorgang des Volumens ist sehr zeitintensiv, da die Kugeln zu einer Ruhelage kommen müssen. In dieser Zeit wird dem Gesamtsystem durch Aufbringen einer starken Dämpfung die Bewegungs- und Rotationsenergie entzogen. Ziel dieses Vorganges ist die Minimierung der kinetischen sowie rotatorische Energie.

Auf dieser Weise können sogenannte Module erstellt werden, die i.d.R. einfache Geometrien (z.B. keilförmige, rechteckige Geometrien) besitzen. Die Erstellung von komplexeren Geometrien ist mit dieser Methode sehr schwierig und bei Geometrien mit schwerzugänglichen Ecken sogar nicht möglich. Alternative ist das Herausschneiden einer bestimmten Geometrie aus einem bestehenden Modul und der Speicherung als neues Modul (siehe folgende Abschnitte). Die Verwendung der Module bringt viele Vorteile, um die Simulationszeit bedeutend zu reduzieren. Vor allem dann, wenn eine Parametervariation durchgeführt werden soll. Für eine Simulation kann so stets derselbe Baustein genutzt werden und somit reproduzierbare Simulationen ermöglichen. Ebenso lassen sich die einzelnen Module frei anordnen und mit einer Startgeschwindigkeit versehen, so dass mehrere Module z.B. miteinander in Wechselwirkung stehen können.

Da die Kugel massenbehaftet sind, lastet auf den unteren Kugeln eine größere Kraft als auf den oberen. Um dies zu vermeiden, werden die Module möglichst flach gestaltet. Abb.

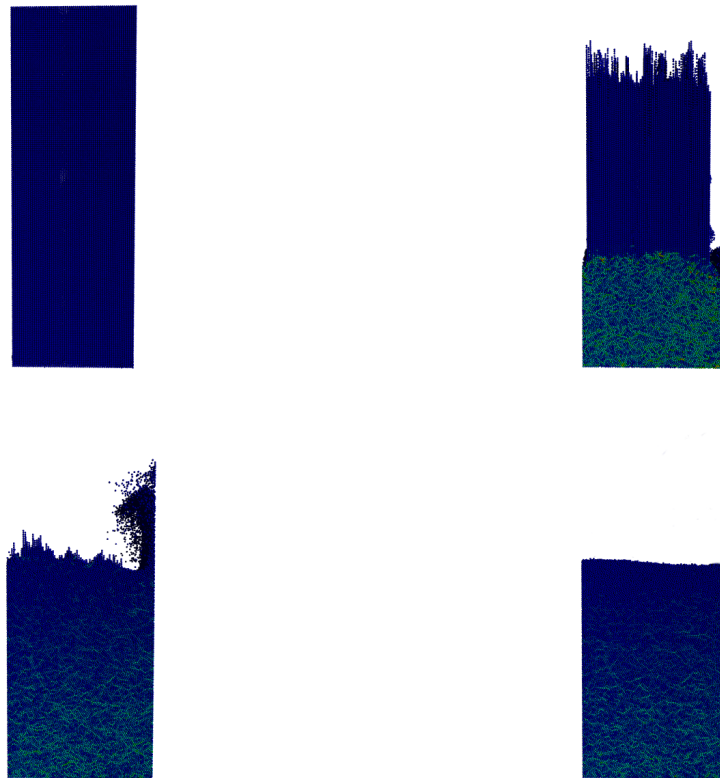


Abbildung 3.1: Füllen eines Quaders mit 100.000 Kugeln

3.2 zeigt ein fertiges Modul.

Um die Koordinaten-Konvention zu erhalten, sollen die Zugproben entlang der z-Richtung gezogen werden. Deswegen soll das fertige Modul noch um die x-Achse gedreht werden (Siehe 3.3), um aus ihm Zugproben entlang der z-Richtung herausschneiden zu können.

3.1 Zugproben für metallische Werkstoffe

Die Objekte für die Zugversuche werden entsprechend der Norm (DIN EN 10002, früher: DIN 50145, DIN 50125) erstellt, um möglichst realitätsnahe Messungen zu erzielen, die vergleichbar sein können mit realen Experimenten.

Für die bevorstehenden Versuche wird die Form B für die Zugproben gewählt, da sie am meisten verwendet wird und geometrisch am Günstigsten ist.

In der Datei `manipulation.ini` (Anhang C) können die Abmessungen des gewünschten Zugstab eingegeben werden, die der obengenannten DIN Norm entnommen werden können.

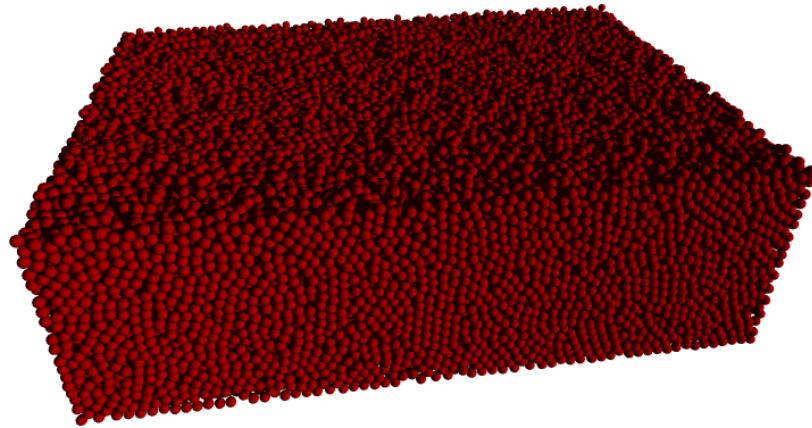


Abbildung 3.2: Fertiges Modul

```

-----+----+-----ZUGSTAB STAHL
14 | mm | Zugstab_stahl_d    -- Probendurchmesser
17 | mm | Zugstab_stahl_h    -- Kopfhöhe
10 | mm | Zugstab_stahl_r    -- Verrundungsradius
20 | mm | Zugstab_stahl_b    -- Kopfdurchmesser

```

Um die Probe herauszuschneiden wird ein fertiges Modul mit ausreichenden Abmessungen geladen, so dass die gewünschte Probe hinein passt. Um die Kontur der Probe mathematisch zu beschreiben wird sie in 3 Bereiche geteilt:

- Steg
- Absatzbereich
- Kopf

Als erstes soll ein Punkt definiert werden, der gleichzeitig der Schwerpunkt der zu heraus-schneidende Probe sein soll. Auf diesen werden die Abmessungen bezogen. Es empfiehlt sich, für jeden Zugversuch mindestens 5 Proben an unterschiedlichen Stellen des geladenen Moduls herauszuschneiden, um systematische Fehler bezüglich der Beschaffenheit der Proben auszuschließen. Da es sich um ein rotatorisches Gebilde handelt, werden Zylinderkoordinaten eingeführt mit z : Höhe und q : Radius

Die Zylinderkoordinate q fasst die beiden kartesischen Koordinaten x und y zusammen:

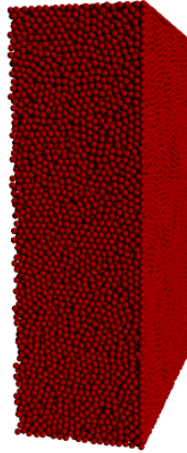


Abbildung 3.3: Gedrehtes Modul

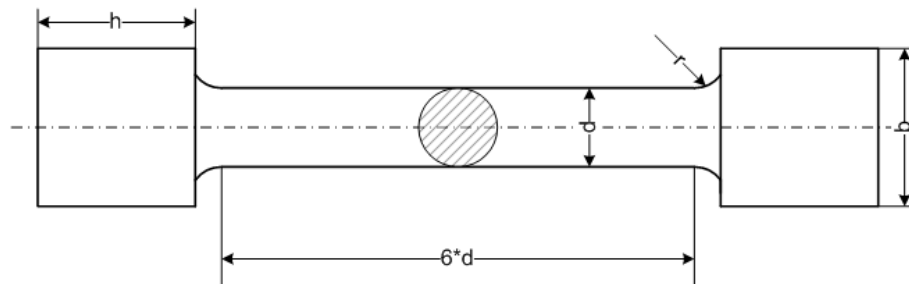


Abbildung 3.4: Runde Probe für metallische Werkstoffe, Form B

$$q = \sqrt{x^2 + y^2} \quad (3.1)$$

Die Kontur der Zugprobe wird dann als Funktion der z-Koordinate auf den 3 getrennten Bereichen definiert.

Der Steg und Kopf der Zugprobe sind einfache Zylinder, somit kann die Funktion der Kontur als eine Konstante definiert werden, die gleich dem Radius $d/2$ bzw. $b/2$ auf den Bereichen $[mp-3d, mp+3d]$ bzw. $[mp-3d-r-h, mp-3d-r] \cup [mp+3d+r, mp+3d+r+h]$ ist.

Die Kreisfunktion wird folgendermaßen definiert:

$$f(t) = t_0 \pm \sqrt{r^2 - (z - z_0)^2} \quad (3.2)$$

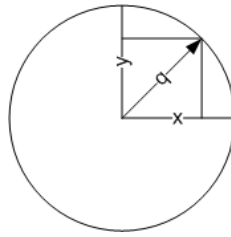
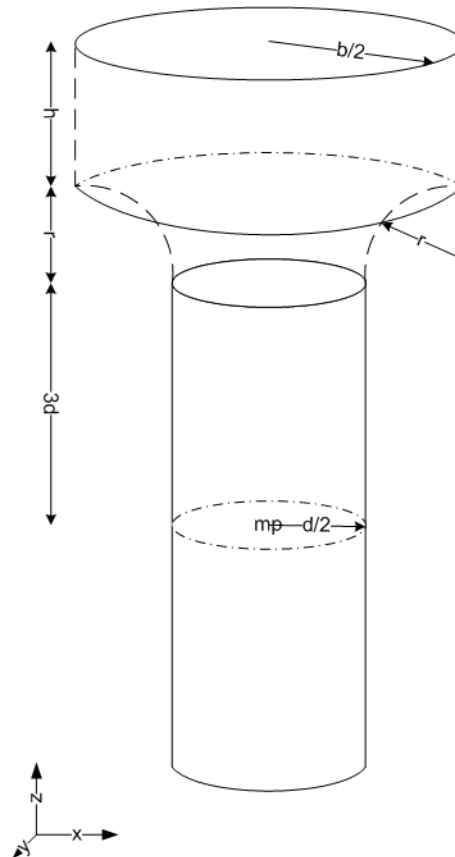
Abbildung 3.5: Zylinderkoordinate q 

Abbildung 3.6: Kontur des Stegs des Zugstabes

Für die beiden gespiegelten Absatzbereiche des Zugstabes wird die Funktion aus Gl. 3.2 an verschiedenen Orten im Raum definiert (Abb. 3.7). Die z -Werte sind aus dem Bereich $]mp - 3d - r, mp - 3d[\cup]mp + 3d, mp + 3d + r[$

für den oberen Bereich werden $t_0 = d/2 + r$ und $z_0 = z_{mp} + 3d$ und für den unteren $t_0 = d/2 + r$ und $z_0 = z_{mp} - 3d$ gesetzt.

Damit ist die Kontur des Zugstabes vollständig definiert. Für jeden Partikel wird die Zylinderkoordinate q berechnet und mit dem entsprechenden Wert der Kontur-Funktion verglichen. Ist q kleiner, wird die Partikel in einen Dummy-Vektor zwischengespeichert. Nachdem alle Partikel durchlaufen wurden, wird der ursprüngliche Vektor auf die neue Länge der gebliebenen Partikel neu allokiert, um Speicherplatz und Rechenzeit zu reduzieren.

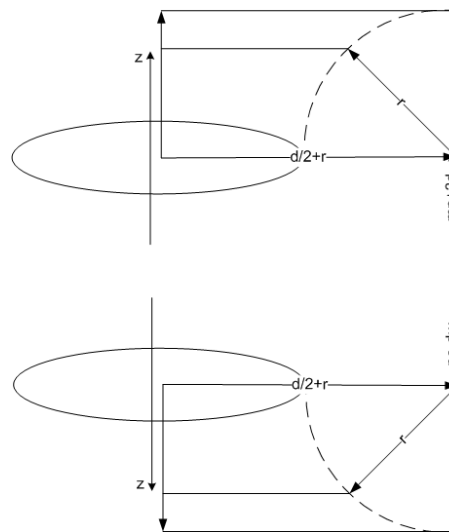


Abbildung 3.7: Konstruktion der Abrundung des Zugstabes

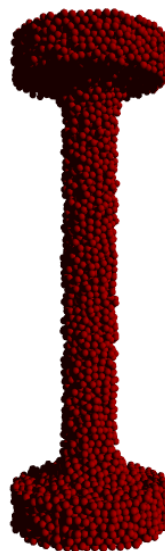


Abbildung 3.8: DEM-Zugprobe für metallische Werkstoffe

Abb. 3.8 zeigt die aus einem DEM-Block herausgeschnittene Zugprobe für metallische Werkstoffe.

3.2 Zugproben für Polymere

Zugversuche für Polymere unterscheiden sich ein wenig von denen für metallischen Werkstoffen, da Polymere ein anders Verhalten aufweisen, bei denen Dehnungen bis zu 1000% möglich sind. Grundlage bildet die DIN EN ISO 527, die die Bestimmung von Zugeigenschaften von Polymeren beschreibt.

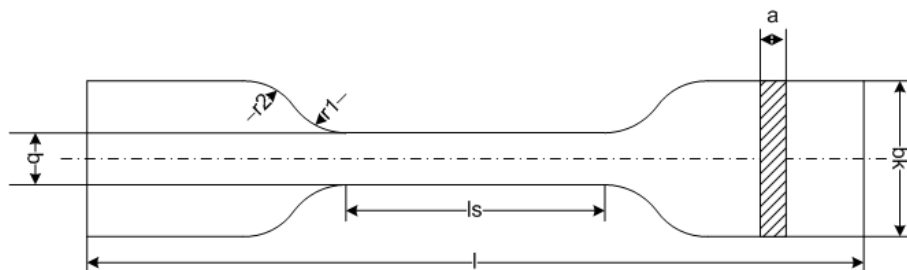


Abbildung 3.9: Zugstab Geometrie für Polymeren nach DIN EN ISO 527

Abb. 3.9 zeigt ein Probekörper des Typ 5. Dieser Typ wurde gewählt, da er am meisten verwendet wird.

In der Datei `manipulation.ini` (Anhang C) können die Abmessungen des gewünschten Zugstab eingegeben werden, die der obengenannten DIN Norm entnommen werden können.

```
-----+-----+-----ZUGSTAB PLASTE
115 | mm | Zugstab_plaste_l      -- Länge der Probe
33  | mm | Zugstab_plaste_ls    -- Länge des Stegs
6   | mm | Zugstab_plaste_b     -- Breite des Stegs
25  | mm | Zugstab_plaste_bk    -- Breite des Kopfes
14  | mm | Zugstab_plaste_r1    -- Radius 1
25  | mm | Zugstab_plaste_r2    -- Radius 2
5   | mm | Zugstab_plaste_a     -- Dicke der Probe
```

Die Kontur der Probe wird wie im Falle der metallischen Werkstoffe in verschiedenen Bereichen durch Funktionen der Koordinate z definiert (Siehe Abb. 3.10).

- Kopf
- Rundung 2
- Rundung 1
- Steg

Die Zugprobe für Polymere ist flach. Deswegen werden die kartesischen Koordinaten beibehalten. Ausgehend vom gewählten Ausschneidepunkt werden als erstes alle Partikel beibehalten, deren y -Koordinate im Bereich $[mp - a/2] \cup [mp + a/2]$ liegt. Anschließend werden die Funktionen für die verschiedenen Bereiche definiert.

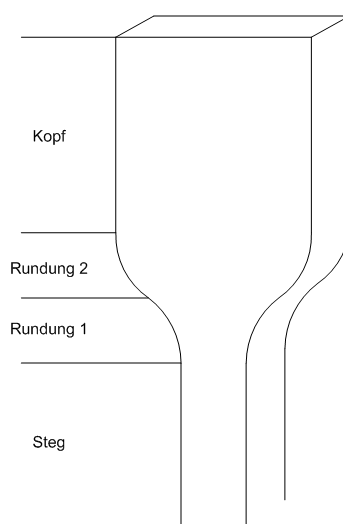


Abbildung 3.10: Bereiche für die Kontur der Zugprobe für Polymere

Der Steg sowie der Kopf der Probe ($z \in [mp - ls/2, mp + ls/2]$) bzw. ($z \in [mp - l/2, mp - ls/2 - r1] \cup [mp + ls/2 + r1, mp + l/2]$) können als eine konstante Funktion $f(t) = b/2$ bzw. $f(t) = bk/2$ definiert werden.

In dem Bereich der Abrundungen müssen zwei Kreisfunktionen aufgestellt werden, die die Radien r_1 und r_2 besitzen (Siehe Abb. 3.11). Diese Funktionen werden nicht in den globalen Koordinaten definiert, sondern es wird eine neue Koordinate zz eingeführt. Um diese Funktionen gleichzeitig bezogen auf die x-Achse zu spiegeln, wird diese Koordinate folgendermaßen definiert:

$$zz = |z - (mp + ls/2)| \quad \forall z \in [mp + ls/2, mp + ls/2 + r2] \cup [mp - ls/2 - r2, mp - ls/2] \quad (3.3)$$

Dadurch wird gleichzeitig die Kontur für den oberen und unteren Teil erstellt. Bezogen auf diese Koordinate werden die Kreisfunktionen definiert.

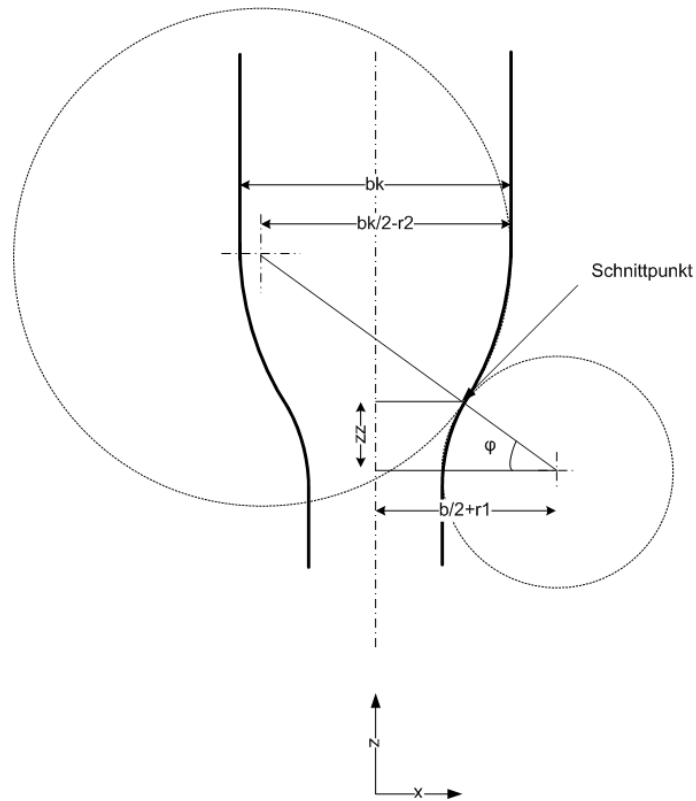


Abbildung 3.11: Konstruktion der abgerundeten Bereichen

$$f_1(zz) = \frac{b}{2} + r_1 - \sqrt{r_1^2 - zz^2} \quad (3.4)$$

$$f_2(zz) = \frac{b_k}{2} - r_2 + \sqrt{r_2^2 - (zz - r_2)^2} \quad (3.5)$$

Der Schnittpunkt beider Kreisfunktionen liegt auf der Verbindungsgerade der Zentren beider Kreise. Hierfür wird der Winkel φ ermittelt, der die Neigung dieser Geraden bestimmt.

$$\varphi = \arctan\left(\frac{r_2}{\frac{b_k}{2} - r_2 + \frac{b}{2} + r_1}\right) \quad (3.6)$$

Die zz_{bp} Koordinate des Schnittpunktes ist somit:

$$zz_{bp} = r_1 \cdot \sin\varphi \quad (3.7)$$

Für die Abrundung mit dem Radius r_1 wird durch die Funktion $f_1(zz)$ der Bereich unterhalb des Schnittpunktes bis zum Steg (d.h. $z \in [mp + ls/2, mp + ls/2 + zz_{bp}]$) definiert. Die Abrundung mit dem Radius r_2 wird durch die Funktion $f_2(zz)$ auf dem

Bereich oberhalb des Schnittpunktes bis zum Zentrum des zweiten Kreises (d.h. $z \in [mp + ls/2 + zz_{bp}), mp + ls/2 + r2]$ beschrieben.

Abb. 3.12 zeigt ein Beispiel für eine herausgeschnittene Zugprobe für Polymere mit wenig Kugelelementen.

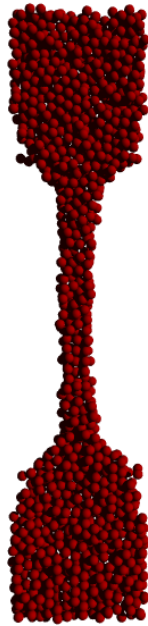


Abbildung 3.12: Zugprobe für Polymere

3.3 Proben für Dämpfungsversuche

Für Dämpfungsversuche ist die Erstellung der Proben relativ einfach, da nur sphärische Partikel gebraucht werden. Hierfür wird eine einfache Kugelfunktion definiert und eine Polarkoordinate q eingeführt.

$$q = \sqrt{(x - mp)^2 + (z - mp)^2 + (z - mp)^2} \quad (3.8)$$

Alle Partikel, die einen q -Wert haben, der niedriger ist als der gewünschte Radius der Kugel, werden beibehalten. Abb. 3.13 zeigt das entsprechende Modell.

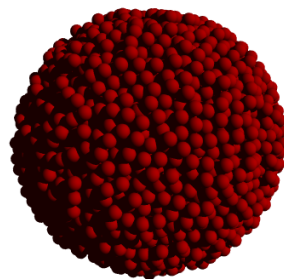


Abbildung 3.13: Kugel-Modell für Dämpfungsversuche

Kapitel 4

Bereitstellung der Versuchsumgebung

Mit dem bisher vorhandenen Code war es möglich, Modelle zu generieren, in dem Kugeln in eine Form eingefüllt werden. Bei diesem dynamischen Vorgang erfahren die Partikel verschiedene Kräfte, die sie in Bewegung setzen. Diese Kräfte werden zu einer Gesamtkraft zusammengefasst, die die Bewegungsrichtung sowie Beschleunigung bestimmt. Nach einer ausreichend langen Zeit und mit entsprechender Dämpfung, kommen diese Kugeln zur Ruhe. Anschließend können sie verclustert und zu Partikel gebündelt werden, um realitätsnahe Simulationen durchführen zu können. Die dadurch entstandenen Modulen können mit demselben Code bei anderen Versuchen in Bewegung gesetzt werden. Damit können beispielsweise zwei Module aufeinander gefahren werden, um einen Prall zu simulieren. Um Modellparameter zu kalibrieren, bedarf es eines Einblicks auf die herrschenden inneren Kräfte zwischen den Partikeln, sowie deren Ausgabe als virtuelle Sensoren. In diesem Kapitel werden die notwendigen Erweiterungen des Codes dargestellt, um Experimente zu simulieren und die Erfassung der Ergebnisse, die als Grundlage für die weitere Kalibrierung dienen sollen.

4.1 Partikel-Partikel-Wechselwirkung

Hauptbestandteil des Codes ist die Ermittlung der Wechselwirkungskräfte, um die Bewegungsgleichungen für jeden Zeitschritt errechnen zu können und somit die Dynamik der Partikel abzubilden. Abb. 4.1 zeigt den Gesamtablauf einer Simulation. In dem ursprünglichen Code werden die Partikel identifiziert und es werden Kollisions- sowie Zugpartner nach entsprechenden Algorithmen ermittelt [17]. Dabei werden nicht die einzelnen Kraftkomponenten jedes Partikelpaares betrachtet, sondern sie dienen nur dazu, die Gesamtkraft eines Partikel zu ermitteln. Es sind also keine Angaben über die einzelnen Verbindungen

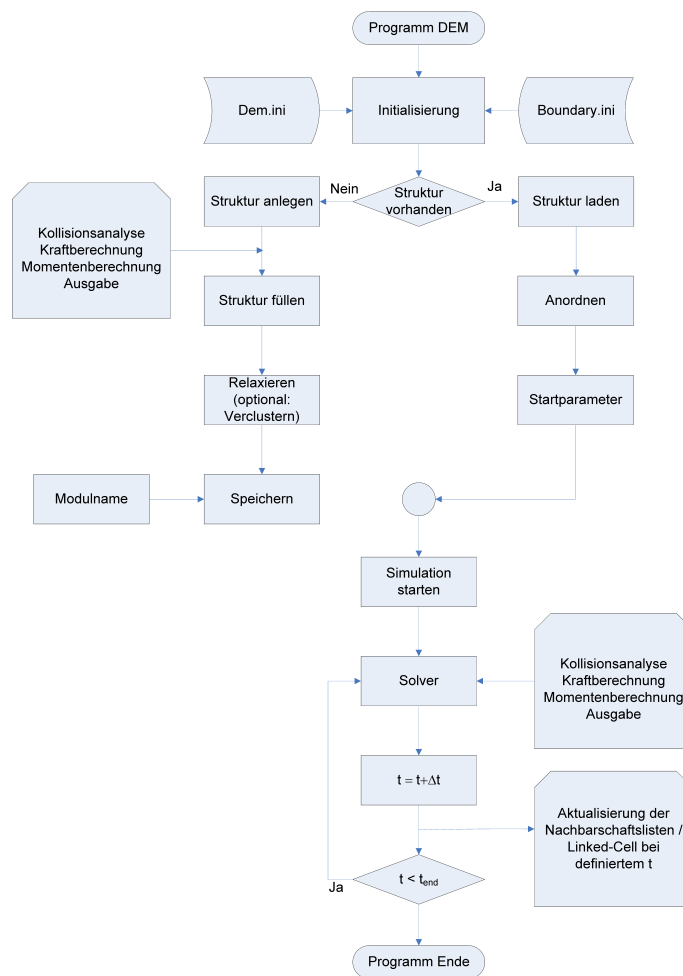


Abbildung 4.1: Programmablauf

vorhanden. Im Hinblick auf die Einführung von Biegebalken als Wechselwirkungsmodell, sowie die Ermittlung von Spannungs- sowie Kraftfelder im Bauteil, ist es notwendig, diese einzelnen Wechselwirkungskäfte in ihren Richtungs-Komponenten zu ermitteln. Ferner soll die Historie jeder einzelnen Verbindung verfolgt werden, um das Lösen von Verbindungen oder die Bildung neuer Verbindungen nachvollziehen zu können.

Je nach Suchradius¹ für Zugpartner werden bis zu 50 Partner pro Partikel erwartet. Diese sollen in einer Liste gespeichert werden, so dass jeder Zeit auf sie zurückgegriffen werden kann. Diese Liste muss eine bijektive Gestalt haben, so dass ausgehend von zwei Partnern die Verbindung ermittelt werden kann und umgekehrt ausgehend von einer Verbindung die Partner gefunden werden können. Als Problematisch erweist sich dabei, dass FORT-RAN keine indizierte Listen besitzt und dass diese Verbindungsliste nach jedem Zeitschritt aktualisiert wird, so dass die Positionen der Verbindungen in dieser Liste sich ständig verändern. Daher ist die Ermittlung der Beziehung Partikelpaar-Verbindung nur mit erheblich zeitaufwändigen Schleifen realisierbar. Es muss ein Konzept entwickelt werden, das mög-

¹Maximaler Abstand von einem Partikel, der erlaubt eine Zugfeder zu setzen

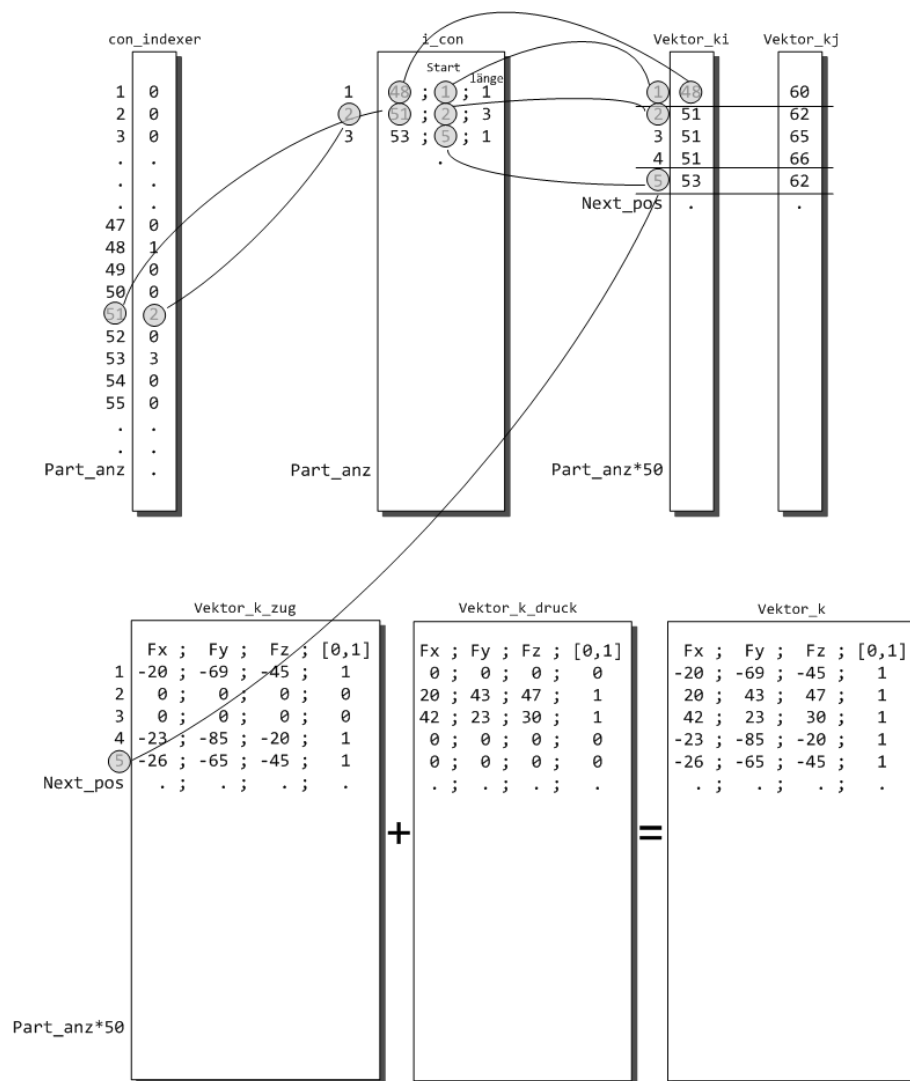


Abbildung 4.2: Konzept der Speicherung von Verbindungen sowie deren Beziehungen (Partikelpaar \leftrightarrow Verbindung)

lichst ohne Schleifen bzw. IF-Abfragen auskommt und gleichzeitig flexibel ist, um andere Funktionen einzubauen.

Es werden zunächst 7 Vektoren benötigt:

- **con_indexer**: Dieser Vektor hat eine Länge die der Anzahl der Partikel entspricht und ist mit Nullen initialisiert. Jedes Partikel, das zum ersten Mal eine Verbindung eingeht, bekommt einen fortlaufenden Index, der über alle Zeitschritte dem Partikel zugeordnet bleibt. Er wird an der Position eingetragen, die der Partikelnummer entspricht, um eine Schleife über diesen Vektor zu sparen. Alle Partikel, die in diesem Vektor eine Null haben, besitzen keine Verbindung und werden somit von den weiteren Routinen nicht mehr betrachtet.
- **i_con**: Dieser Vektor ist ein Steuervektor für die Vektoren, in denen Verbindungen

gespeichert werden. In diesem werden die Partikel eingetragen, die mindestens eine Verbindung besitzen und einen Index im Vektor `con_indexer` besitzen. Dieser Index definiert gleichzeitig ihre Position im `i_con` Vektor. Dabei wird die Partikelnummer in der ersten Dimension des Vektors gespeichert und in der Zweiten erfolgt die Eintragung einer Startposition in allen `k`-Vektoren (siehe Abb. 4.4). In der dritten Dimension wird die Länge des für die Partikel reservierten Bereiches gespeichert. Diese Länge ist variabel und entspricht der Anzahl der Partner der jeweiligen Partikel.

- `vektor_ki`, `vektor_kj`: In diesen beiden Vektoren werden die Partner des Partikel-paares eingetragen. Die Position, in der sie eingetragen werden, wird von `i_con` abgeleitet und über die Position wird die Verbindung identifiziert: die `k`-te Position steht für die Verbindung der beiden Partikel, die in den beiden Vektoren `vektor_ki` und `vektor_kj` an der `k`-ten Position stehen.
- `vektor_k_zug`, `vektor_k_druck`, `vektor_k`: In diesen Vektoren werden die Komponente der jeweiligen Verbindung gespeichert, sowie eine logische Variable, die die Verbindung als aktiv oder gebrochen markiert. Gebrochene Verbindungen werden nicht von den Vektoren entfernt, sondern mit 0 markiert und die Kräfte somit auf 0 gesetzt. Das erspart den Aufwand, bei einer möglichen Entfernung einer Verbindung, die Positionen der Verbindungen neu aufzustellen. Zugkräfte bekommen ein negatives Vorzeichen und werden in `vektor_k_zug` eingetragen. Druckkräfte erhalten ein positives Vorzeichen und werden in `vektor_k_druck` eingetragen. Die Summe der beiden Vektoren ergibt den `vektor_k`, der alle Werte beinhaltet. Diese Trennung ist für einige Subroutinen programmiertechnisch von Vorteil.

4.1.1 Erfassung von Wechselwirkungen

Abb. 4.3 verdeutlicht, wie Wechselwirkungen erfasst werden und in geeigneter Form in den oben eingeführten Vektoren gespeichert werden. Eine Schleife durchläuft alle Partikel, und für jedes Partikel werden Wechselwirkungspartner je nach ausgewähltem Verfahren und Suchalgorithmus gefunden. Dabei gilt es, dass das `i`-te Partikel als Master angesehen wird. Das heißt seine Wechselwirkungspartner können nur eine größere Partikelnummer besitzen. Die Suche nach Wechselwirkungspartner geht immer von dem `i`-ten Partikel aufwärts, um Redundanzen auszuschließen. Wird ein Partner (Zug oder Druck) gefunden, wird als Erstes überprüft, ob das `i`-te Partikel schon im Vektor `con_indexer` registriert ist und einen Index besitzt. Dies ist der Fall, wenn das Partikel in der Vergangenheit schon andere Wechselwirkungen besaß bzw. besitzt. Hat das Partikel noch keinen Partner (siehe Abb. 4.4), wird der Wert `relation_idx` an dessen Position eingetragen und anschließend der Wert von `relation_idx` um eine Einheit erhöht. Der Index, den das Partikel nun bekommen hat, definiert dessen Position im Vektor `i_con`, an der die Partikelnummer eingetragen wird,

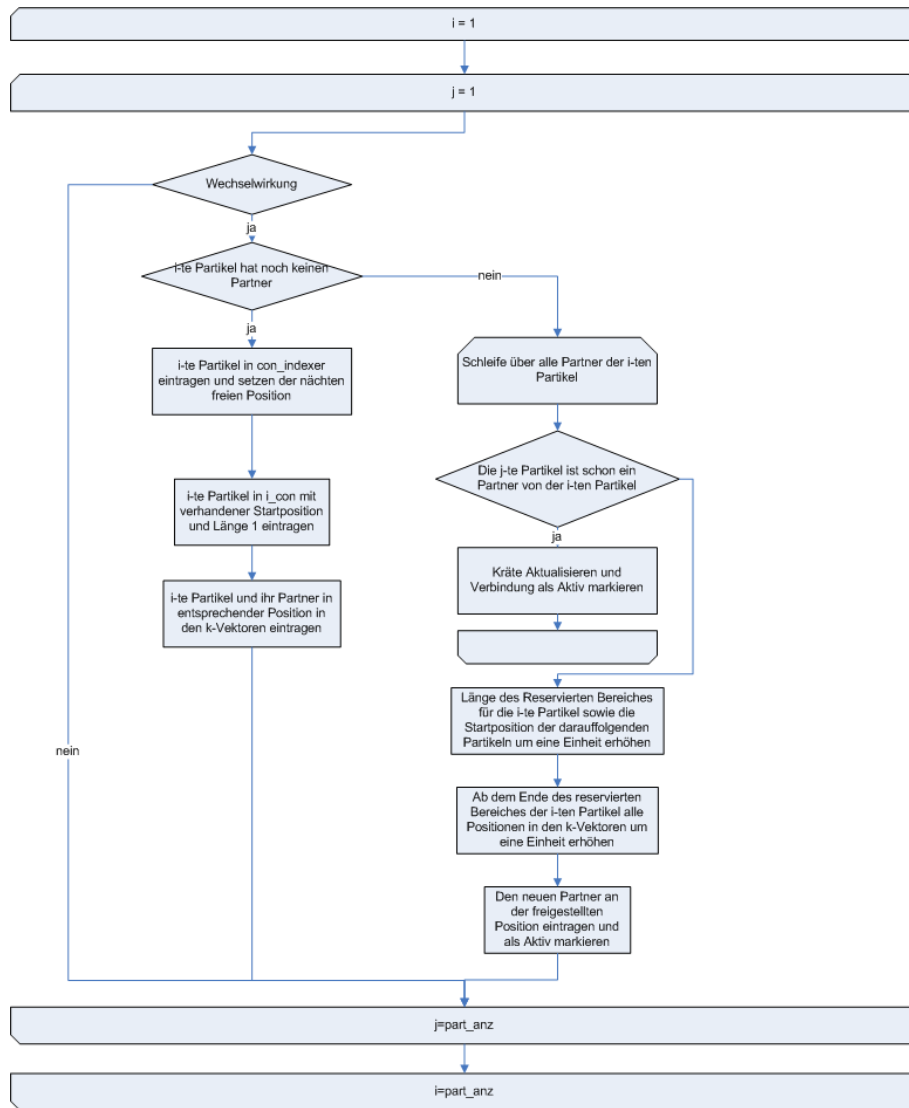


Abbildung 4.3: Vorgehensweise für die Erfassung und Speicherung von Wechselwirkungen

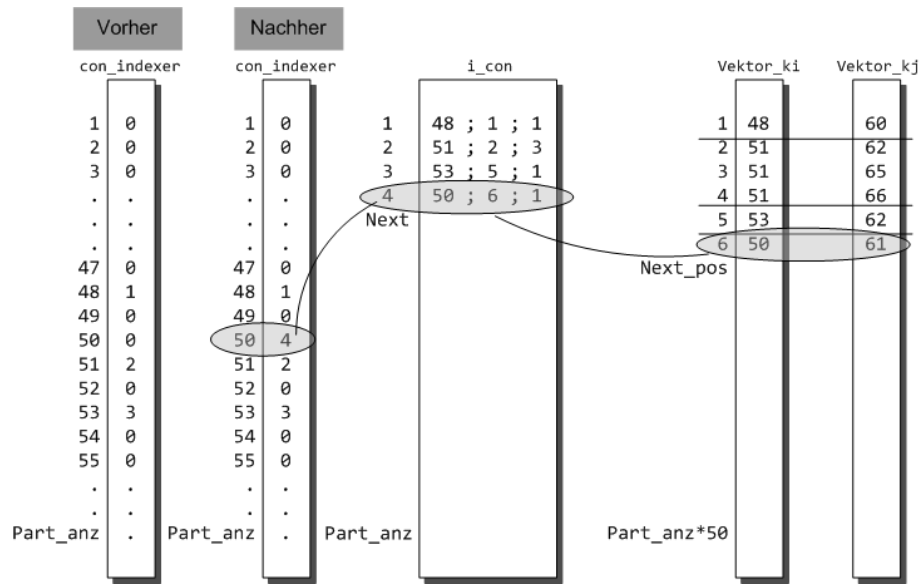


Abbildung 4.4: Eintragung einer Partikel, die ihre erste Verbindung einget

eine Startposition sowie die Länge 1. Diese Angaben bestimmen den reservierten Bereich für das nächste i-te Partikel wo ihre Wechselwirkungspartner gespeichert werden. Anschließend wird an der ersten Stelle des Bereiches die Nummer des i-ten Partikel im **vektor_ki** sowie die Partnernummer im **vektor_kj** abgelegt.

Falls das i-te Partikel bereits einen Index in **con_indexer** besitzt, wird nach diesem durch diesen Index im **i_con** gesucht und die Startposition und Länge ausgelesen. Es wird anschließend in dessen reservierten Bereich gesucht, ob der aktuelle Wechselwirkungspartner vorhanden ist. Bei einem Treffer werden nur die Kräfte aktualisiert. Ansonsten bedeutet das, dass es sich um einen neuen Partner handelt (Abb. 4.5).

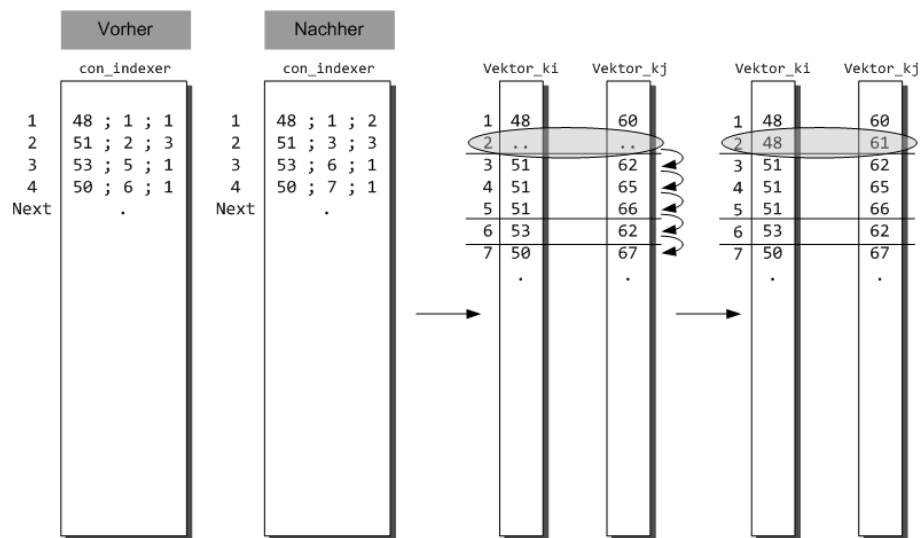


Abbildung 4.5: Eintragung einer neuen Verbindung

In diesem Fall wird die Länge des Bereiches im **i_con** um eine Einheit erhöht und gleich-

zeitig alle Startpositionen der darauffolgenden Partikel um eine Einheit erhöht. Dadurch wird in den k-Vektoren Platz am Ende des reservierten Bereiches geschaffen, um die neue Verbindung einzutragen.

Der Vorteil dieses relativ umständlichen Verfahrens zur Speicherung der Verbindung ist, dass eine Zuordnung (Verbindung-Wechselwirkungspaar) in den k-Vektoren über alle Zeitschritte eindeutig bleibt. Durch Angabe von Verbindungsnummern, kann direkt auf das Wechselwirkungspaar zurückgeschlossen werden, in dem man die Zeile in k-Vektoren anspricht die die gleiche Nummer besitzt, wie die angegebene Verbindung. Durch Angabe eines Wechselwirkungspaares können die Verbindungsnummern, sowie Werte ermittelt werden, indem eine kurze Schleife, nur die gespeicherten Partner eines der beiden Partikel durchläuft. Dies erhöht die Leistungsfähigkeit des Codes beträchtlich.

4.1.2 Setzen der Zugkräfte

In der DEM-Simulation fester Werkstoffe spielen die Zugkräfte die wichtigste Rolle, die das Verhalten des Werkstoffes bestimmen, da es sich schließlich um Zugversuche handelt. Im Gegensatz zur Simulation granularer Werkstoffe, bei denen die Druckkräfte maßgebend das Verhalten des Systems bestimmen, sorgen die Zugkräfte für den Zusammenhalt einzelner Partikel um einen festen Zustand zu erreichen. Je stärker die Zugkraft ist, desto höher ist die Festigkeit des simulierten Modells. Beim Erreichen einer kritischen Dehnung soll es zum Bruch kommen und die Zugverbindungen müssen entsprechend gelöst werden. Allerdings soll die Simulation eine Erstellung neuer Zugverbindungen ermöglichen. Dies ist der Fall, wo viskoelastisches Verhalten simuliert werden soll. Für dieses Verhalten sind zwei Ansätze entwickelt worden²:

- **Plastizität bei Zugbeanspruchung:** Die Wechselwirkung zur Beschreibung der anziehenden und abstoßenden Kräfte werden um einen plastischen Anteil erweitert. Die Zugfeder verhalten sich bis zu einer bestimmten Grenzdeformation vollständig elastisch. Darin schließt sich ein weiterer Bereich mit einem niedrigen E-Modul an. Die Spannungsdehnungskurve wird so weit fortgesetzt bis ein Bruch bzw. eine Entlastung eintritt. Die Entlastung erfolgt mit dem ursprünglichen E-Modul, sodass sich eine Hysterese und dauerhafte Verformung ergibt.
- **Plastizität bei Scherbeanspruchung:** Bei diesem Modell verhalten sich die Feder bis zum Bruch elastisch. Falls jedoch zwei Elemente, die nicht mehr miteinander verbunden sind, gegeneinander gedrückt werden, werden diese beiden Partikel durch eine neue, undeformierte Feder miteinander verbunden. Bei starker Verformung kommt

²Im Rahmen eines Forschungsprojekt am Fraunhofer UMSICHT in Zusammenarbeit mit ICP Universität Stuttgart: Modellgestützte Optimierung von Zerkleinerungswerkzeugen

es zu einem wiederholten Brechen und Wiederverbinden von Federn. Hierdurch tritt eine plastische Energiedissipation auf, da gedehnte, energiegeladene Federn durch ungedehnte ersetzt werden. (Energiedissipation tritt ebenfalls durch die bereits beschriebene Reibung und Dämpfung auf; diese Anteile sind allerdings gegenüber der Bruchenergie vernachlässigbar.) Es hat sich gezeigt, dass dieses Modell besser geeignet ist, um die tatsächlichen Verhältnisse in duktilem Material zu beschreiben.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde der zweite Ansatz verfolgt. Abb. 4.6 veranschaulicht die programmiertechnische Realisierung dieses Ansatzes:

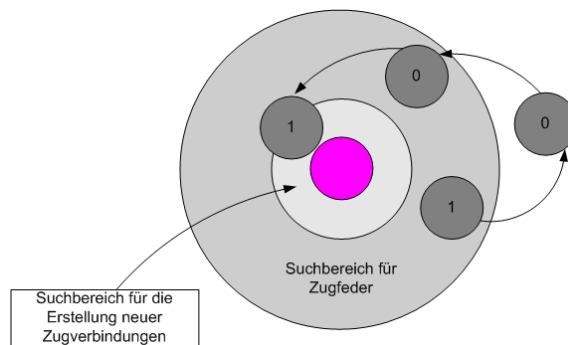


Abbildung 4.6: Regeln für Trennen oder Setzen einer Zugkraft

Beim Starten einer Simulation werden zuerst innerhalb eines angegebenen Suchradius (dunkler Bereich) Zugfedern im ungedehnten Zustand gesetzt und diese mit einer 1 markiert. Diese Zugverbindungen bleiben solange erhalten, bis die Zugfeder die definierte maximale Dehnung überschreitet und anschließend wird sie mit einer 0 als gebrochen markiert. Kommt ein Partikel in den Bereich eines anderen Partikels, bei dem Zugverbindungen noch bestehen, wird es durch ihre markierten 0 als noch nicht bestehende Verbindung erkannt. Entsprechend wird keine Zugfeder gesetzt. Erst wenn sich die Partikel nah genug genähert haben und sich innerhalb eines Suchradius befinden (heller Bereich), der die Entfernung bestimmt ab dem Zugfedern gesetzt werden können, wird eine neue Verbindung erzeugt.

4.2 Kraftsensor

Nach der Erfassung der einzelnen Komponenten einer Wechselwirkung zwischen zwei Partikel ist es möglich geworden, Kräfte an jedem Ort eines Moduls sowie die beteiligten Partikel zu ermitteln. Um ein Kraft-Weg- bzw. Spannungs-Dehnungsdiagramm zu erstellen, muss die Gesamtkraft an einem Querschnitt einer Probe ermittelt werden.

Abbildung 4.7 zeigt den Querschnitt einer DEM Probe. Es wird dadurch deutlich, dass es unmöglich ist, eine glatte Oberfläche aus einem DEM-Modell herauszuschneiden. Umso schwieriger ist es, die Elemente zu definieren, die zu einer Oberfläche gehören sollen sowie



Abbildung 4.7: Querschnitt einer Zugprobe

alle Kräfte die durch die Fläche wirken. Eine Lösung dieses Problems besteht darin, eine virtuelle Trennlinie anzusetzen und alle Kräfte zu erfassen, die an dieser Linie wirken.

Abb. 4.8 zeigt eine schematische Darstellung für die Konstellation der Wechselwirkungen zwischen Partikelelementen, die zur Ermittlung der Gesamtkraft über einem Querschnitt führt. Es werden 2 Bereiche definiert, jeweils unterhalb und oberhalb der angesetzten Trennlinie. Für jedes i -te Partikel eines Bereiches werden Wechselwirkungspartner j gesucht. Es wird anschließend überprüft, ob das j -te Partikel im gegenüberliegenden Bereich liegt. Ist das der Fall, heißt das, dass die Wechselwirkungskraft (Zug oder Druck) durch die Trennlinie geht und somit diese Kraft erfasst werden kann. Die Summe aller Kräfte stellt dann die Gesamtkraft dar, die durch die Trennlinie geht. Im Gleichgewichtszustand muss die Gesamtkraft gleich Null sein, da Zug und Druckkräfte sich aufheben. Um zu garantieren, dass alle Wechselwirkungspartner gefunden werden, die eine Kraft besitzen, die über die Linie geht, muss der Bereich mindestens genau so groß wie der Suchradius für Zugkräfte sein.

4.3 Programmierung der Versuche

Es sollen drei Versuche programmiert werden: Zugversuch, Scherversuch und Dämpfungsversuch. Für jeden dieser Versuche müssen entsprechende Routinen programmiert werden, die es ermöglichen die Versuche durchzuführen und entsprechende Messungen und deren Ausgabe auszuführen. Bei der Programmierung dieser Versuche wurde darauf geachtet,

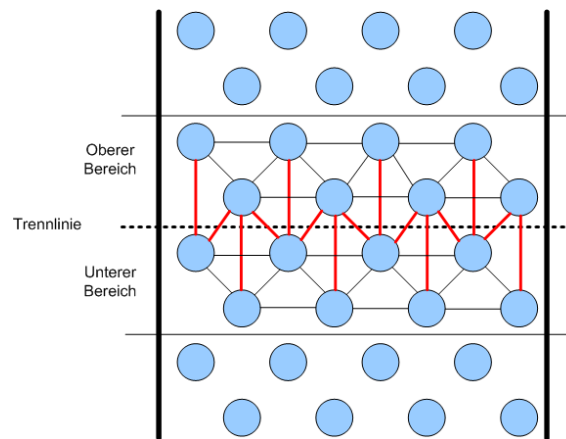


Abbildung 4.8: Erfassung der Kräfte, die durch eine Fläche gehen

dass der vorhandene Code flexibel erweitert wird und möglichst gekapselte Routinen erstellt werden, die sich leicht im gesamten Code integrieren lassen. Um möglichst wenig Eingriffe auf den eigentlichen Source-Code der DEM Simulation vorzunehmen, wurden organisatorische Routinen für die Durchführung und Speicherung der Versuchsergebnisse auf ein SHELL Skript ausgelagert. Dieser ermöglicht folgende Varianten:

- Modul generieren
- Modul drehen
- Herausschneiden einer Zugprobe für Stahl
- Herausschneiden einer Zugprobe für Kunststoffe
- Herausschneiden einer Kugel für Dämpfungsversuche
- Herausschneiden einer Probe für Scherversuche
- Durchführung eines Zugversuches
- Durchführung eines Dämpfungsversuches
- Durchführung eines Scherversuches

Die Auswahl der gewünschten Variante erfolgt über die Eingabe eines definierten Schlüssels. Dieser Schlüssel wird an das eigentliche Simulationsprogramm (Kraftzentren.prg) übergeben, um entsprechend zu reagieren. Für Versuche sorgt das SHELL-Skript dafür, dass für jeden Versuch ein Verzeichnis mit einer fortlaufenden Nummer erstellt wird, indem die von der Simulation erzeugten Daten und Bilder gespeichert werden. Um jederzeit nachvollziehen zu können, mit welchen Parametern die Simulation gestartet wurde, werden zusätzlich die Initialisierungsdateien des jeweiligen Versuchs in das Verzeichnis kopiert. Mit diesem Skript ist es auch möglich, mehrere Versuche im Voraus zu planen, die sequentiell hintereinander gestartet werden können.

4.3.1 Setzen der Versuche

Bei einem Zugversuch wird eine Zugprobe an zwei Klemmen eingeklemmt, wobei die untere Klemme sie festhält und die obere eine Zugkraft in axiale Richtung aufbringt. Das gleiche Verfahren wird beim simulierten Zugversuch verfolgt.

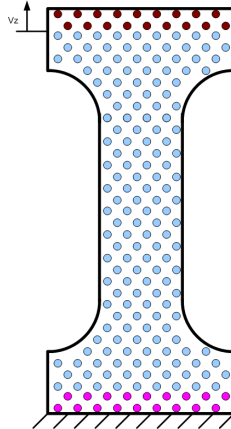


Abbildung 4.9: Bestimmung der Klemmzone einer Zugprobe

In der Datei `manipulation.ini` (Anhang C) können die Verfahrensgeschwindigkeiten des Zugversuchs angegeben werden:

```
-----+---+-----ZUGVERSUCH
0 |mm/s| ZUG_v_x      -- Zuggeschwindigkeit in x-Richtung
0 |mm/s| ZUG_v_y      -- Zuggeschwindigkeit in y-Richtung
1 |mm/s| ZUG_v_z      -- Zuggeschwindigkeit in z-Richtung
10 | mm | ZUG_TOP_rand  -- Dicke der oberen Klemmzone
10 | mm | ZUG_BOTTOM_rand -- Dicke der unteren Klemmzone
```

Üblicherweise wird die Geschwindigkeit nur in z-Richtung angesetzt, aber es besteht zusätzlich die Möglichkeit mehraxiale Zugversuche durchzuführen. Die beiden unteren Parameter bestimmen die Dicke der Klemmzonen (siehe Abb. 4.9).

Die Probe soll also mit einer konstanten Geschwindigkeit gezogen werden. Das kann erreicht werden, indem die Partikel der oberen Klemmzone sich mit einer konstanten Geschwindigkeit nach oben bewegen. Da die Partikel beim Aufbringen einer Kraft belastet werden und somit ihre Bewegung beeinflusst wird, muss dafür gesorgt werden, dass die ziehenden Partikel ihre konstante Geschwindigkeit beibehalten.

Die Bewegungsgleichung eines Partikels kann folgendermaßen ausgedrückt werden:

$$\dot{x}_i = \ddot{x}_i \cdot \Delta t + v_{i0} \quad (4.1)$$

mit:

$$\ddot{x}_i = \frac{F}{m_i} \quad (4.2)$$

ergibt:

$$\dot{x}_i = \frac{F}{m_i} \cdot \Delta t + v_{i0} \quad (4.3)$$

Damit die Geschwindigkeit der Partikel konstant bleibt d.h. $v_i = v_{i0}$, muss der Teil $F_i \cdot m_i \cdot \Delta t$ gleich Null gesetzt werden. Dies ist der Fall, wenn die Kraft verschwindet. Die Lösung besteht also darin, die Kräfte an den Partikel der Klemmzonen vor jedem Zeitschritt gleich Null zu setzen. So behalten sie ihre gleichmäßige Geschwindigkeit.

Bei einem Scherversuch wird auf ähnlicher Weise vorgegangen, in dem wieder zwei Klemmzonen selektiert werden und die Kräfte der einzelnen Partikel dieser Zonen gleich Null gesetzt werden. Der einzige Unterschied besteht darin, dass die Bewegungsrichtung in x-, y-Richtung oder in beiden Richtungen erfolgt. Dafür müssen die entsprechenden Geschwindigkeitskomponenten in der `manipulation.ini` (C) angesetzt werden.

```
-----+----+-----SCHERVERSUCH
1 |mm/s| SCHER_v_x      -- Zugeschwindigkeit in x-Richtung
1 |mm/s| SCHER_v_y      -- Zugeschwindigkeit in y-Richtung
0 |mm/s| SCHER_v_z      -- Zugeschwindigkeit in z-Richtung
10 | mm | SCHER_TOP_rand  -- Dicke der oberen Klemmzone
10 | mm | SCHER_BOTTOM_rand -- Dicke der unteren Klemmzone
```

4.3.2 Setzen der Kraftsensoren

Während eines Zug- oder Scherversuches sollen die Kräfte an verschiedenen Stellen der Probe erfasst werden. In einem realen Zugversuch wird diese Kraft am unteren festen Teil gemessen. Um in der Simulation den Verlauf der Kräfte in der gesamten Probe zu überprüfen, wird die Kraft an mehreren Stellen gemessen. Dafür wurde eine Routine programmiert die es ermöglicht, den Kraftsensor an einer beliebigen Stelle anzusetzen. Im Rahmes dieser Arbeit wurden für Zugversuche drei Stellen gewählt, an denen die Kräfte in z-Richtung gemessen werden (Abb. 4.10).

Da quasistatische Versuche durchgeführt werden, sollen die drei angesetzten Sensoren das gleiche Ergebnis liefern. Bei dynamischen Versuchen wird erkennbar, dass die Kräfte sich in Form einer Welle ausbreiten, die jeden Sensor zeitversetzt passiert.

Für Scherversuche können ebenfalls Sensoren an verschiedenen Stellen angesetzt werden. Allerdings sind die gemessenen Kräfte in x- und y- Richtung.

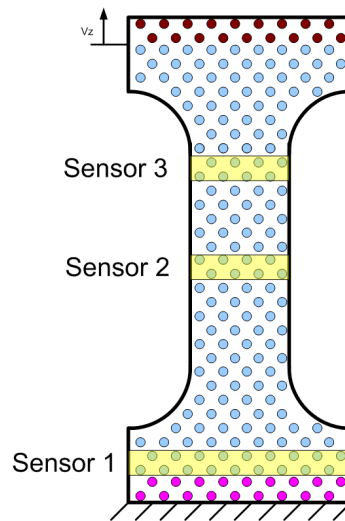


Abbildung 4.10: Verteilung der Kraftsensoren auf einer Zugprobe

4.3.3 Setzen des Wegsensors

Der Wegsensor lässt sich realisieren, indem ein einziges Partikel der beweglichen Klemmzone markiert und dessen Koordinate verfolgt wird. Der Weg s ist folgendermaßen definiert:

$$s_x(t) = x_i(t + \Delta t) - x_i(t) \quad (4.4)$$

$$s_y(t) = y_i(t + \Delta t) - y_i(t) \quad (4.5)$$

$$s_z(t) = z_i(t + \Delta t) - z_i(t) \quad (4.6)$$

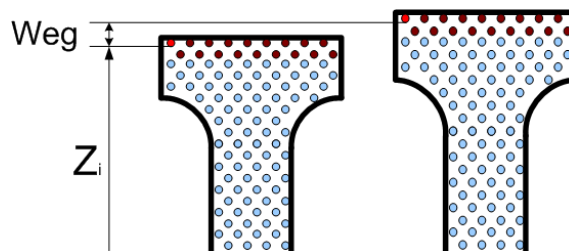


Abbildung 4.11: Wegmessung an einer Zugprobe

Der aufgeführte Wegsensor gilt sowohl für Zugversuche und Scherversuche, als auch für Dämpfungsversuche, bei denen die Koordinate des Mittelpunktes der Versuchskugel verfolgt wird.

4.3.4 Graphische Ausgabe der Sensoren

Für jeden Zeitschritt werden die Kräfte der Sensoren in eine Datei geschrieben. Diese Datei dient als Quelle für die graphische Auswertung des Diagramms. Mit Hilfe der freiverfügbaren Software GNU Plot wird für Zug- und Scherversuche ein Kraft-Weg-Diagramm erstellt.

Das entsprechende GNU-Plot Skript für die Ausgabe wird in den Simulationsskript eingebaut, sodass bei der Durchführung einer Simulation gleichzeitig die benötigten Grafiken erstellt und ausgegeben werden. Für Dämpfungsversuche wird nur die Höhe über die Zeit aufgetragen da keine Kräfte benötigt werden.

Die graphische Ausgabe wird anhand dieses GNU-Codes durchgeführt, der in dem SHELL Skript eingebettet wird, der die Versuchsumgebung steuert:

```
gnuplot << EOF
set title 'Kraft-Weg-Diagramm'
set terminal svg
set output 'kraftweg.svg'

set xlabel 'Weg [mm]'
set xlabel 'Kraft [N]'

plot 'kraft_weg' us 1:2 title 'Sensor: Steg' with line,
'kraft_weg' us 1:3 title 'Sensor: Sockel' with line;

EOF
```

Das Diagram namens Kraft-Weg-Digramm wird als Vektorgraphik mit dem namen kraftweg.svg gespeichert wird, wo die Kraft in N über den Weg in mm aufgetragen wird.

Kapitel 5

Kalibrierung

Die DEM-Simulation basiert auf dem im Abschnitt 2.2.1 eingeführten rheologischen Modell, wo die Materialeigenschaften sich durch die im Kontaktmodell definierten Kontaktparameter beschreiben lassen. Die Beziehung zwischen Kontaktparameter und Materialeigenschaften lässt sich jedoch nicht analytisch ermitteln. Die Werte für diese Parameter können nur durch eine Kalibrierung des Modells ermittelt werden. Dabei sollen die Parameter solange variiert werden, bis die Ergebnisse der Simulation mit der Realität in guter Näherung übereinstimmen. Je nach Anwendungsgebiet und Kontaktmodell, können verschiedene Herangehensweisen entwickelt werden, um die Modellparameter zu kalibrieren. Dabei stellen die Abhängigkeiten zwischen den Parametern ein potentielles Problem dar, da sie sich gegenseitig beeinflussen. Somit ist die Kalibrierung der Parametern einzeln nicht möglich.

Es gibt statistische Optimierungsmethoden, die es ermöglichen einen Parametersatz abhängiger Größen zu ermitteln, so dass die Abweichungen der modellierten Daten von den empirischen Daten so gering wie möglich sind. Stellvertretend sind Ausgleichungsverfahren. Ziel dabei ist die bestmögliche Anpassung von Widersprüchen in einem Parametersatz einer Funktion, so dass er am Ende abgeschätzt werden kann, damit die Funktion einen bestimmten erwarteten Verlauf annimmt. Gauß hat bei seiner 2. Begründung die Ausgleichungsprinzipien über bestimmte Optimaleigenschaften der Lösung hergeleitet. Diese Denkweise, die auch heute noch aktuellen Ansätzen der Statistik entspricht, führt zur Charakterisierung einer Parameterschätzung als beste, lineare, unverzerrte Schätzung und hebt so nochmals die Bedeutung der Gaußschen Lösung hervor [18]. Stellvertretend ist die Methode der *kleinsten Quadrate*, die auf dem Prinzip beruht, dass an den Parametern kleine Verbesserungen angebracht werden können, so dass die Quadratsumme der Abweichungen von der erwarteten Funktion minimal gehalten werden. Je nach funktionalem und stochastischem Modell, das bei solchen Verfahren entwickelt wird, können Korrelationen zwischen den Parametern aufgedeckt und abgeleitet werden.

5.1 Abschätzung der Parameter

Die Effizienz der statistischen Optimierungsmethoden hängt stark von der Anzahl der Stützpunkte ab, die bei der Abschätzung der Parameter genutzt werden. Das ist der Grund, warum statistische Methoden im Rahmen dieser Arbeit nicht genutzt werden können. Die zur Verfügung stehende Zeit reicht nicht aus, genug Simulationen durchzuführen, um eine statistische Auswertung zu ermöglichen. Andere Verfahren, wie das mehrdimensionale Newton-Verfahren benötigen ebenso eine große Anzahl an Stützpunkten. Deswegen kann es in dieser Arbeit zu keiner systematischen Kalibrierung der Modellparameter kommen, da alleine die Entwicklung der virtuellen Versuchsumgebung sowie die Erfassung der Partikel-Partikel-Wechselwirkungen und deren Speicherung in dynamischen Linked-Listen, die für diese Arbeit zur Verfügung stehende Zeit aufbraucht. Jedoch wird angestrebt, qualitative Ergebnisse zu erzielen, die Fehlerquellen bei der Anwendung des entwickelten DEM-Modells sowie die Versuchsumgebung aufzudecken und sie möglichst zu beheben. Für möglichst vertretbare qualitativen Beurteilung der Simulationen müssen jedoch Parameterwerte ermittelt werden, die anschließend iterativ verändert werden, um das Verhalten der simulierten Probe anzupassen.

5.1.1 Physikalischer Hintergrund

Für eine erste Abschätzung wird der Zugstab bestehend aus 2 Partikel angenommen. So können die Federsteifigkeit und Dämpfungskoeffizient direkt aus dem E-Modul abgeleitet werden.

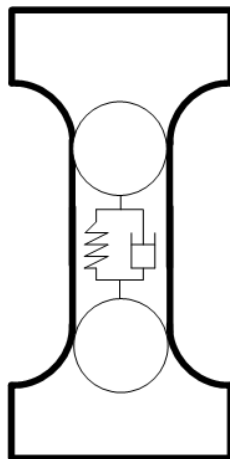


Abbildung 5.1: Vereinfachung des Zugstabes zu einem einzigen Feder-Dämpfer-System

Mit der Vereinfachung (Abb. 5.1) kann die Bewegungsgleichung des Systems aufgestellt werden.

$$k\Delta l + \gamma v = ma \quad (5.1)$$

wobei Δl für die Dehnung des Zugstabes steht und v für die Zuggeschwindigkeit.

Um eine Differentialgleichung zu bekommen wird Gl. 5.1 umgeschrieben:

$$kx + \gamma \dot{x} = m\ddot{x} \quad (5.2)$$

$$\ddot{x} + \frac{\gamma}{m}\dot{x} + \frac{k}{m}x = 0 \quad (5.3)$$

Dies führt zu einer homogenen Differentialgleichung zweiter Ordnung. Mit der Einführung der Eigenfrequenz $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$ und dem Dämpfungsfaktor $\zeta = \frac{\gamma}{2m}$ erhält man:

$$\ddot{x} + 2\zeta\dot{x} + \omega_0^2 x = 0 \quad (5.4)$$

Um Gl. 5.4 zu lösen, wird die zugehörige charakteristische Gleichung aufgestellt:

$$\lambda^2 + 2\zeta\lambda + \omega_0^2 = 0 \quad (5.5)$$

deren Lösung ist:

$$\lambda_{1,2} = -\zeta \pm \sqrt{\zeta^2 - \omega_0^2} \quad (5.6)$$

Über die Art der durch Gleichung 5.4, beschriebene Schwingung entscheidet die Diskriminante $D = \frac{\zeta}{\omega_0}$, auch Dämpfungsmaß genannt.

- $D < 1$: Gedämpfte Schwingung
- $D > 1$: Aperiodische Schwingung (Kriechfall)
- $D = 1$: Aperiodische Schwingung (Grenzfall)

Ein Zugversuch ist ein quasistatischer Vorgang, bei dem jede Schwingung im Material unterdrückt werden soll. Deswegen wird der aperiodische Grenzfall in Betracht gezogen, um die Federkonstante und Dämpfungskoeffizient abzuschätzen:

$$D = 1 : \text{Aperiodisch} \Rightarrow \frac{\zeta}{\omega_0} = 1 \Rightarrow \zeta = \omega_0 \quad (5.7)$$

$$(5.8)$$

Diese Bedingung bestimmt die Beziehung zwischen k und γ :

$$\frac{\gamma}{2m} = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (5.9)$$

$$\Rightarrow \gamma = 2m\sqrt{\frac{k}{m}} \quad (5.10)$$

Letztendlich ist:

$$E = \frac{\sigma}{\epsilon} = \frac{k \cdot \Delta l \cdot l}{A \cdot \Delta l} = \frac{k \cdot l}{A} \quad (5.11)$$

$$k = \frac{E \cdot A}{l} \quad (5.12)$$

Wobei A die Querschnittsfläche der Zugprobe ist.

$$\gamma = 2m\sqrt{\frac{E \cdot A}{m \cdot l}} \quad (5.13)$$

Somit wird eine direkte Beziehung zwischen den Größen k und γ als Funktion des E-Moduls ausgedrückt. Für jeden Werkstoff können diese Größen analytisch abgeschätzt werden. Im weiteren Verlauf der Kalibrierung muss ein geeignetes Variationsverfahren gefunden werden, um diese Werte zu korrigieren und ggf. Korrelationsbeziehungen abzuleiten.

Eine weitere durchaus wichtige Größe die abgeschätzt werden soll, ist der Simulationszeitschritt Δt . Diese Größe ist für die Genauigkeit der Simulation von großer Bedeutung. Je kleiner der Zeitschritt ist, umso genauer ist die Simulation. Dafür müssen Einbußen bei der Simulationsdauer hingenommen werden, so dass ein Kompromiss gefunden werden soll, um den optimalen Zeitschritt zu finden, der die Ergebnisse der Simulation nicht signifikant beeinträchtigt.

Der Zeitschritt Δt muss also noch die schnellstmögliche Bewegung im System erfassen können. Es wird also angenommen, dass höchstens 5% der Verlängerung einer Zugfeder in jedem Zeitschritt möglich sind. Dabei wird von der schnellstmöglichen Bewegung im System ausgegangen. Eine Kraft in einem Werkstoff kann sich mit der Schallgeschwindigkeit c im Werkstoff ausbreiten. Deswegen wird die Schallgeschwindigkeit als schnellstmögliche Bewegung im DEM Modell angenommen.

$$\Delta l = 0,05 = c \cdot \Delta t \quad (5.14)$$

mit

$$c = \sqrt{\frac{E}{\rho}} \quad (5.15)$$

ergibt

$$\sqrt{\frac{E}{\rho}} \cdot \Delta t = 0,05 \quad (5.16)$$

$$\Delta t = \frac{0,05}{\sqrt{\frac{k \cdot l}{A \cdot \rho}}} \quad (5.17)$$

Beim Einsatz realistischer Materialparameter sind extrem kleine Schritte für eine stabile Integration erforderlich. Dies würde jedoch die zur Verfügung stehende Rechenzeit um mehrere Größenordnungen übersteigen. Der kleine Zeitschritt resultiert aus der sehr kleinen Masse der einzelnen Partikel, wobei die Trägheit der Partikel praktisch bei einem quasi-statischen Vorgang keine Rolle spielt. Um den Zeitschritt zu erhöhen, kann die geringe Trägheit der Partikel um mehrere Größenordnungen skaliert werden [27]. Simulationen mit einer (sehr Zeitaufwändigen) trägheitslosen Dynamik haben gezeigt, dass eine Skalierung um mehr als zehn Größenordnungen problemlos möglich ist [4]. Wird die Partikelmasse zu stark erhöht, kommt es allerdings zu unerwünschten Trägheitseffekten. Vor Beginn jeder Simulation, insbesondere mit neuen Materialparametern, muss daher eine ausreichend kleine Partikelmasse sichergestellt werden.

5.1.2 Startparameter

Da das Verhalten elastischer Werkstoffe einfacher nachzubilden ist, werden sich die Startparameter im ersten Durchlauf an dem Verhalten von Stahl orientieren. Mit Hilfe von den im vorherigen Abschnitt abgeleiteten Formeln, werden Federsteifigkeit, Dämpfungskoeffizient und Zeitschritt berechnet und in die Simulation eingegeben. Um den Einfluss von Federsteifigkeit und Dämpfung getrennt von dem Einfluss der Reibung untersuchen zu können, wird ein Zugstab aus, an einem Gitter geordneten Kugeln erstellt und simuliert und dabei wird kein Fließverhalten betrachtet. Auf der Basis der gelieferten Simulationsergebnisse werden die Startparameter auf den normalen ¹ Zugstab übertragen und die dabei hervorgerufenen Abweichungen untersucht. Dabei werden folgende Annahmen getroffen:

- Zugstab besteht vereinfacht aus 2 Kugeln wie in Abb. 5.1
- Masse der Kugelementen ist gleich Eins: $m = 1$
- Radien der Kugelementen ist gleich Eins: $r = 1$
- Die Kugelemente berühren sich : $l = 2 \cdot r$
- E-Modul Stahl: $E = 210000 \cdot 10^3 Nm^{-2}$

¹Zugstab mit zufällig angeordneten Kugeln

Das Einsetzen in Gl. 5.12 ergibt:

$$k = \frac{E \cdot A}{l} = \frac{E \cdot \pi \cdot r}{2} = \frac{210 \cdot 10^6 \cdot 3,14}{2} = 329,7 \cdot 10^6 \text{ Nm}^{-1} \quad (5.18)$$

Für γ ergibt das Einsetzen in Gl. 5.13:

$$\gamma = 2m\sqrt{\frac{E \cdot A}{m \cdot l}} = 2 \cdot 1 \sqrt{\frac{210 \cdot 10^6 \cdot 3,14}{1 \cdot 2}} = 36315,28 \text{ s}^{-1} \quad (5.19)$$

Und für Δt ergibt das Einsetzen in Gl. 5.17

$$\Delta t = \frac{0,05}{\sqrt{\frac{k \cdot l}{A \cdot \rho}}} = \frac{0,05}{\sqrt{\frac{329,7 \cdot 10^6 \cdot 2}{\pi \cdot 1 \cdot 7850}}} = 4,32 \cdot 10^{-4} \quad (5.20)$$

Der analytisch ermittelte Zeitschritt Δt führte zu einer Explosion des Zugstabes, was vermuten lässt, dass der Zeitschritt noch kleiner eingestellt werden muss. Deswegen wird auf den berechneten Zeitschritt verzichtet und nur dessen Hälfte in die Simulation eingegeben.

Die folgende Tabelle fasst die Simulationsparameter mit einem kleineren Zeitschritt zusammen:

Parameter	Symbol	Wert
E-Modul[N/m ²]	E	$210 \cdot 10^6$
Zeitschritt [s]	Δt	$1 \cdot 10^{-5}$
Simulationszeit [s]	t	3
Zuggeschwindigkeit [mm/s]	v_z	1
Federsteifigkeit (Druck)[N/m]	k	329700000
Federsteifigkeit (Zug)[N/m]	k	329700000
Dämpfungskoeffizient [N/(m/s)]	γ	36315
Reibungskoeffizient [-]	μ	0
Maximale Dehnung der Zugfeder [-]		4%
Suchradius für Zugfeder [mm]		3

Tabelle 5.1: Simulationsparameter mit Startwerten

Abb. 5.2 zeigt das Kraft-Weg-Diagramm zu der ersten Simulation mit den Startparametern, wo eine Zugprobe mit geordneten Kugelementen benutzt wird. Auf dem Diagramm ist das linear-elastische Verhalten am Anfang der Simulation zu erkennen, wo die beiden Sensoren am Sockel und am Steg der Probe die gleichen Kräfte messen. Ab einer Dehnung um

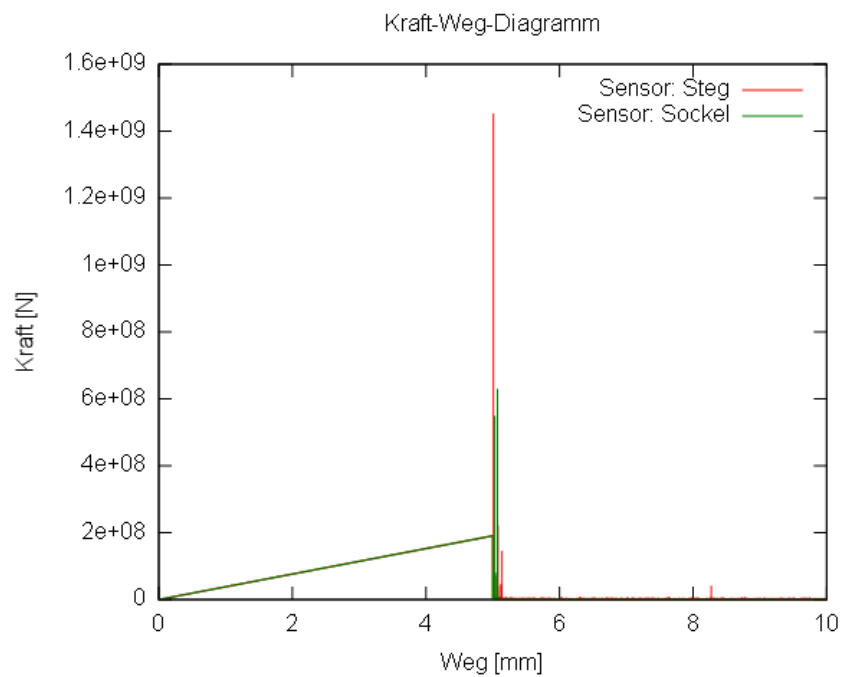


Abbildung 5.2: Kraft-Weg-Diagramm einer Zugprobe mit geordneten Kugelementen und Startparametern

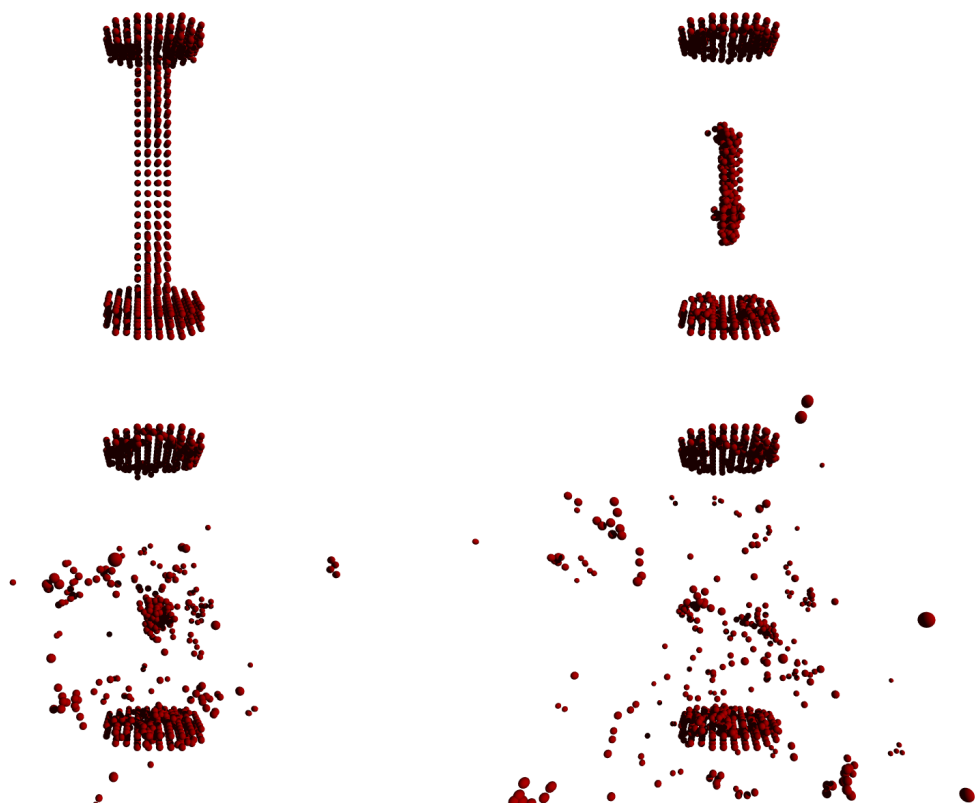


Abbildung 5.3: Zugversuch einer Zugprobe mit geordneten Kugelementen und startparametern

4,5 mm werden plötzlich sehr hohe Kräfte aufgezeichnet, die sofort abfallen. Wie Abb. 5.3 zeigt, kommt es nach einer kritischen Dehnung zum Bruch der Probe. Dabei werden ruckartig Zugverbindungen gebrochen. Die Kugelemente, die an dem Bruch beteiligt sind, werden von den anderen Nachbarn mit einer sehr großen Kraft gezogen. Dabei kommt es zu einer sehr hohen Beschleunigung der Partikel, die mit anderen Elementen kollidieren. Der Grund für die Explosion nach dem Bruch ist, dass der Zeitschritt immer noch zu groß ist, sodass der Algorithmus die Kollision zweier Partikel erst dann erfasst, wenn sie zu tief ineinander gedrungen sind. Daraus entsteht eine sehr große abstoßende Kraft die dazu führt, dass die Kugel explosionsartig auseinander fliegen. Deswegen muss der Zeitschritt noch kleiner eingestellt werden. Der Einsatz derselben Simulationsparametern auf einer normalen Probe führt ab dem ersten Zeitschritt zu einer Explosion der Probe wie Abb. 5.6 zeigt. Der folgende Abschnitt erläutert die Behandlung dieses Problems.

5.2 Relaxierung der Proben

Wie in Kapitel 3 erläutert wurde, werden Versuchsproben aus Blöcken herausgeschnitten. Diese Blöcke entstehen durch Schütten von Kugeln, die sich durch die Schwerkraft innerhalb eines virtuellen Behälters verteilen. Da alle Kugeln massenbehaftet sind, kommt es am Boden des Behälters zu relativ höheren Spannungen als am oberen Ende. D.h. auf die unteren Kugel wirkt das Gewicht aller darüber liegenden Kugeln (Siehe Abb. 5.4).

Je nach eingestelltem Zeitschritt bei der Erstellung dieser Blöcke kommt es als Folge dieser Kräfte zu Überlappungen der Kugeln. Diese Überlappungen konnten, mit einer dafür geschriebene Routine, zahlenmäßig ausgegeben und bestätigt werden. Dieser Fehler wird folglich auf die herausgeschnittenen Versuchsproben übertragen.

Beim Starten einer Simulation mit diesen Versuchsproben und Einstellen größerer Federsteifigkeiten kommt es zu einer Explosion der Probe (Siehe Abb. 5.6), wobei die Kugel auseinander fliegen. Dieses Phänomen ist auf die Überlappung der Kugeln zurückzuführen, die beim Erstellen des Blocks selbst keine große Auswirkung haben, da die Kugel einen Gleichgewichtszustand anstreben und die Druckkräfte und die Gewichtskraft sich ausgleichen. Bei der Simulation mit einem größeren Wert für die Federsteifigkeit wirken jedoch durch kleinste Überlappungen sehr große Kräfte und die Kugeln sind nicht mehr im Gleichgewicht.

Ein weiterer Grund für die Störung des Gleichgewichtes ist beim Herausschneiden der Versuchsproben zu suchen. Abb. 5.5 stellt diesen Vorgang dar:

Der entwickelte Algorithmus für das Herausschneiden der Versuchsproben definiert die dreidimensionale Kontur der Probe als virtuelle Trennfläche. Alle Kugeln, die sich innerhalb dieser Fläche befinden, bleiben erhalten, und die außerhalb entfernt werden. Dabei

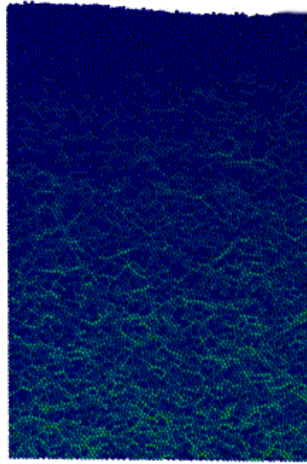


Abbildung 5.4: Unter Schwerkraft belastete Kugelemente eines Moduls

werden den Randkugelementen Partner weggenommen, mit welchen sie in Wechselwirkung standen. Dadurch entstehen freie Verbindungen wie die Abb. 5.5 rechts zeigt.

Wenn die Simulation startet, versuchen sich die Kugeln so anzuordnen, dass sie, durch neue Positionen die verlorenen Wechselwirkungen ausgleichen. Bei größeren Zeitschritten kommt es allerdings beim ersten Zeitschritt zu großen Bewegungsabständen. Die daraus entstandene Kraft ist größer als die Zugkraft der verbliebenen Zugfedern und es kommt letztendlich zu einer Explosion der Probe (Siehe Abb. 5.6). Um zu verhindern, dass beim Herausschneiden die Verbindungen verloren gehen, gibt es die Überlegung, die Versuchsproben mit einer zusätzlichen Schicht von Kugeln zu umhüllen, die sich bei der Simulation nicht beteiligen (Abb. 5.5 Links). Die Kugelemente dieser Schicht dienen als Wechselwirkungspartner der Randelemente der Probe, damit diese ihren Gleichgewichtszustand beibehalten können. Allerdings ist diese Lösung physikalisch nicht vertretbar, da zusätzliche Außenkräfte auf die Probe wirken. Der Einfluss dieser Kräfte könnte bei der Kalibrierung vermindert werden, wird allerdings im Rahmen dieser Arbeit nicht mehr verfolgt.

Die Lösung dieses Problems besteht darin, die Modelle und Proben zu relaxieren. Dabei werden alle äußeren Kräfte abgeschaltet und die Kugel bekommen ihre Freiheitsgrade, damit sie sich ungehindert bewegen können. Um rasche Bewegungen der Kugel zu verhin-

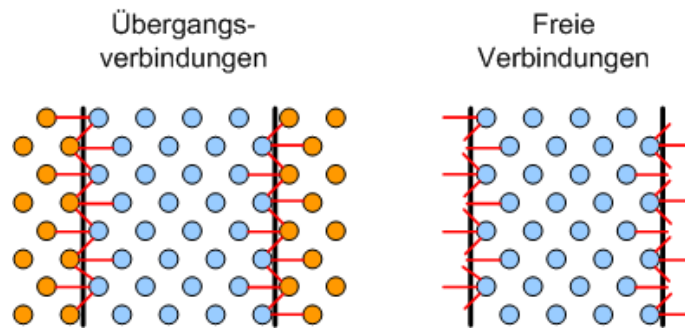


Abbildung 5.5: Trennung der Verbindungspartner bei dem Herausschneiden einer Versuchsprobe

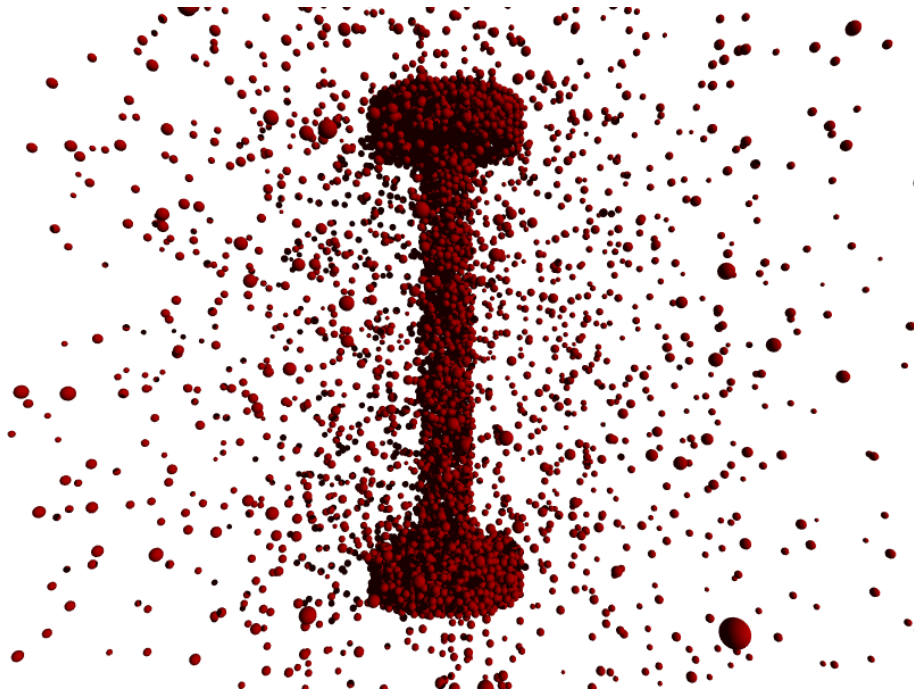


Abbildung 5.6: Explodierende Zugprobe

dern, wird eine große Dämpfung eingeführt, um dem System Energie zu entnehmen. Dabei ist darauf zu achten, dass eine zu große Dämpfung ungünstige Auswirkungen hat, da die Wechselwirkungen zwischen den Kugeln sich wie eine extrem harte Feder verhalten. Bei dieser Relaxierung geht es darum, Überlappungen zu beheben, indem die Federsteifigkeit der Druckfedern höher gestellt wird als die der Zugfedern. Erst dann sind die Kugeln in der Lage, sich gegenseitig abzustößeln bis sie sich gerade berühren und gleichzeitig durch die Zugfedern zusammengehalten werden. Da bei diesem Vorgang die Federsteifigkeit angehoben wird, wird ein kleiner Zeitschritt sowie eine lange Simulationszeit benötigt, um den Kugeln Zeit zu lassen, eine Gleichgewichtslage zu finden.

Trotz der Relaxierung der Probe lassen sich kleinste Überlappungen nicht vollständig vermeiden. Allerdings lässt sich ihr Einfluss auf die Probe verringern, sodass es zu keiner Explosion kommt.

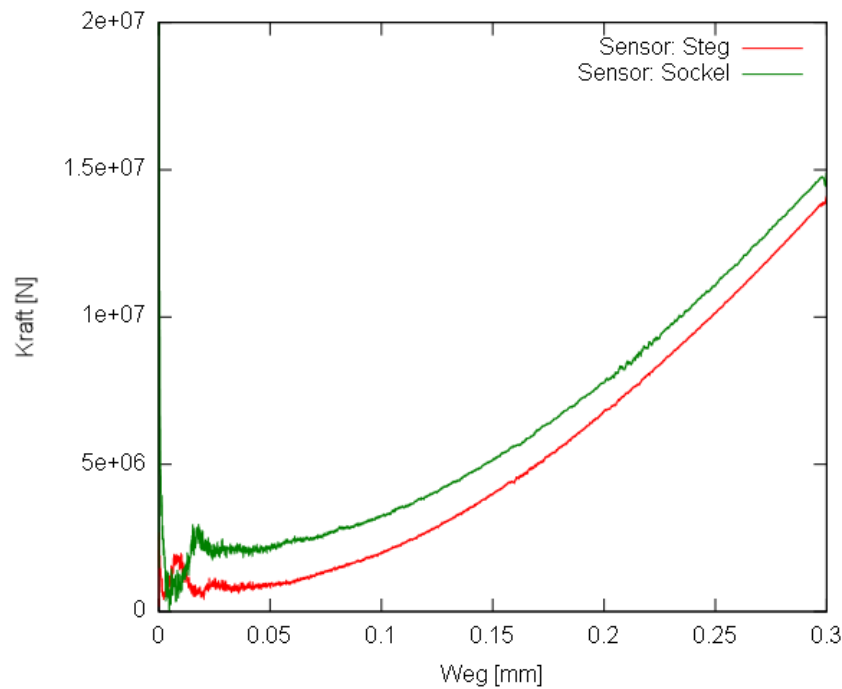


Abbildung 5.7: Einfluss der Überlappungen auf einen Zugversuch

Bei der Simulation eines Zugversuches wird erwartet, dass die Querschnittskraft am Anfang Null ist, da die Zugprobe im Gleichgewichtszustand sein soll und die Summe aller Kräfte über ihren Querschnitt null ist, um dann linear anzusteigen. Bei der durchgeführten Simulation messen die Kraftsensoren jedoch eine Anfangskraft, die abfällt, und wieder ansteigt (Abb. 5.7). Der Grund für diese Anfangskraft ist die restliche Überlappung, die durch die Relaxierung nicht vollständig aufgehoben werden konnte. Die Zugprobe versucht am Anfang diese Kräfte abzubauen bis die Kugelelemente ihre Gleichgewichtslage finden und die Kräfte sich aufheben. Danach reagiert die Probe auf die äußere Zugkraft, wo die Sensoren einen fast linearen Anstieg der Querschnittskraft verzeichnen. Dieser Abschnitt der Kurve kann als sekundäre Relaxierung der Probe betrachtet werden. Da sowohl die Kraft als auch die Dehnung relativ klein sind, kann diese sekundäre Relaxierung vernachlässigt werden.

Der Abbildung ist auch zu entnehmen, dass die beiden Sensoren ähnliche Kurven aufzeichnen aber mit doch einer geringen Abweichung. Diese Abweichungen sind in dem Diagramm groß dargestellt, jedoch bei normaler Skalierung ist der Unterschied kaum erkennbar (Abb. 5.8). Eine mögliche Erklärung für die beobachteten Abweichungen könnte daran liegen, dass der Sensor am Sockel einen größeren Querschnitt und somit mehr Kugelelemente (817 Kugeln) besitzt als der Sensor am Steg (102 Kugeln). Durch diese relativ höhere Anzahl an Kugelelemente werden mehr Kräfte erfasst, was zu diesen unerheblichen Unterschied führt. Am Anfang der Kurve ist auch klar zu sehen, dass die Sensoren zeitversetzt einen wellenartigen Verlauf der Kraft aufzeichnen. Dieser Versatz ist auf die Natur der Ausbrei-

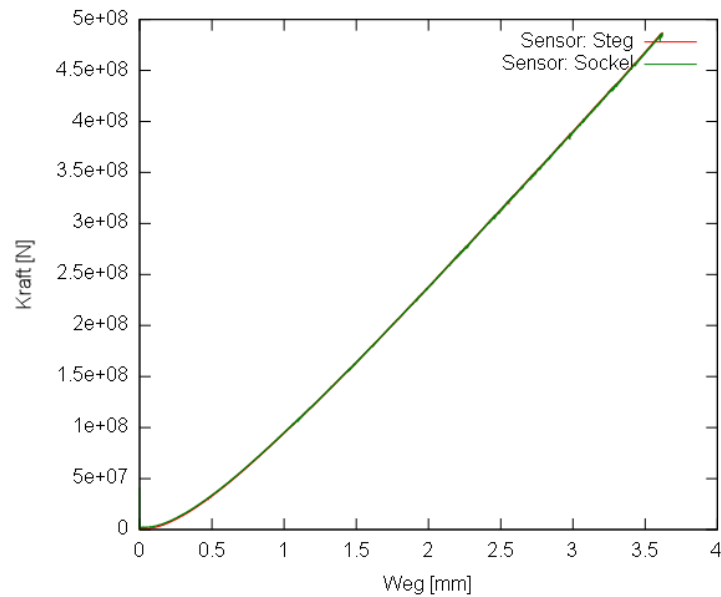


Abbildung 5.8: Zugversuch für eine relaxierte Probe

tung der Kraft in der Probe zurückzuführen. Die Zugprobe wird von oben mit einer Kraft beansprucht. Diese breitet sich in Form einer Welle entlang der Probe aus. Deswegen passiert die Welle den Sensor am Steg zuerst bevor sie an dem Sensor am Sockel ankommt. Die Auswirkung der Dämpfung ist ebenso deutlich zu sehen, da diese Welle nach dem zweiten Ausschlag abklingt. Dies ist zwar kein aperiodischer Fall wie in Abschnitt 5.1.1 angenommen, aber eine sehr gute Annäherung zu dem gewünschten Verhalten. Eine entsprechende Erhöhung der Dämpfung sollte den Ausschlag der Kurve noch verringern.

Die beiden aufgezeichneten Kurven weisen ein Rauschen in den Messungen auf, das mit der Zeit nachlässt. Die Quelle dieses Rauschen konnte nicht untersucht werden, allerdings liegt die Vermutung nahe, dass es sich dabei um eine Überlagerung mehrerer Wellen handelt, die zu lokalen Schwingungen führen, die eine andere Frequenz haben, wo die eingestellte Dämpfung sie nicht unterbinden kann. Diese führt jedoch im Laufe der Zeit zu einer Verringerung dieses Rauschens, wie die Kurve zeigt.

Der Einsatz der gleichen Simulationsparameter wie in Tab. 5.1 auf einer relaxierten Probe ergibt das folgende Diagramm:

Das Diagramm zeigt ein deutlich lineares Verhalten der Probe, das von dem Einfluss der Überlappung nur am Anfang der Simulation beeinflusst wird. Dieses Ergebnis ist ein Beweis für den Erfolg der oben beschriebenen Relaxierung sowie der abgeschätzten Startparametern.

5.3 Auswertung der Simulationen

Um den Einfluss der Modellparameter aufzuzeigen, wurden Simulationen durchgeführt bei Variation dieser Parameter. Dabei handelt es sich um keine Kalibrierung sondern um repräsentative Ergebnisse. Vollständige Simulationen bis zum Bruch konnten nicht durchgeführt werden wegen der langen Simulationszeit, deswegen kann der Einfluss der Parameter auf das Bruchverhalten der Proben nicht demonstriert werden. In den folgenden Simulation wurde jedoch die in Abb. 5.1.1 erläuterte Skalierung der Masse nicht realisiert und somit konnte der Ansatz in der vorliegenden Kalibrierung nicht überprüft werden.

Aus Abb. 5.8 geht hervor, dass die Simulation einen E-Modul von $131 \cdot 10^6 [N/m^2]$ ergibt, das ca. im Verhältnis 1:2 zum angenommenen E-Modul steht. Dieser Wert stellt eine gute Ausgangslage für die zukünftige Kalibrierung dar. Im Laufe der nächsten Simulationen wird deutlich, dass dieser Wert durch Änderung der Modellparameter um einige Größenordnungen variieren kann.

5.3.1 Einfluss der Dämpfung

Die Dämpfung dient dazu, dem System Energie zu entziehen und damit die Partikel zu stabilisieren, sodass sie zu große Beschleunigungen unterbindet. Eine von außen wirkende Kraft breitet sich im Bauteil in Form einer mechanischen Welle aus. Ohne Dämpfung würde diese Welle ungehindert das Bauteil durchlaufen. Allerdings kann die Dämpfung nicht beliebig verändert werden, da eine zu niedrige Dämpfung keinen sichtbaren Einfluss auf die Simulation hat, wohingegen eine zu große Dämpfung wie eine harte Feder wirkt und die Verbindung starr wird, es gilt also ein Optimum zu finden.

Durch die Abschätzung der Dämpfung (Gl. 5.19) wurde eine gute Näherung zu diesem Optimum erreicht, die dann durch eine Kalibrierung zum richtigen Wert konvergieren kann. Für die Kalibrierung der Dämpfung sind Dämpfungsversuche vorgesehen, wo eine diskretisierte Kugel durch ihre Schwerkraft fallen gelassen wird, um gegen den Boden zu prallen. Die Höhendifferenz vor und nach dem Prall ist ein Maß für die Dämpfung eines Werkstoffes. Jedoch wurden solche Dämpfungsversuche in dieser Arbeit nicht durchgeführt.

Die Abbildungen 5.2, 5.3, 5.4 zeigen den gemessenen Einfluss der Dämpfung in einem Zugversuch.

Parameter	Symbol	Wert
E-Modul[N/m ²]	E	$210 \cdot 10^6$
Zeitschritt [s]	Δt	$1 \cdot 10^{-5}$
Simulationszeit [s]	t	5
Zuggeschwindigkeit [mm/s]	v_z	1
Federsteifigkeit (Druck)[N/m]	k	329700000
Federsteifigkeit (Zug)[N/m]	k	329700000
Dämpfungskoeffizient [N/(m/s)]	γ	0
Reibungskoeffizient [-]	μ	0
Maximale Dehnung der Zugfeder [-]		2%
Suchradius für Zugfeder [mm]		2

Tabelle 5.2: Simulationsparameter bei einem Dämpfungskoeffizient von 0 [N/(m/s)]

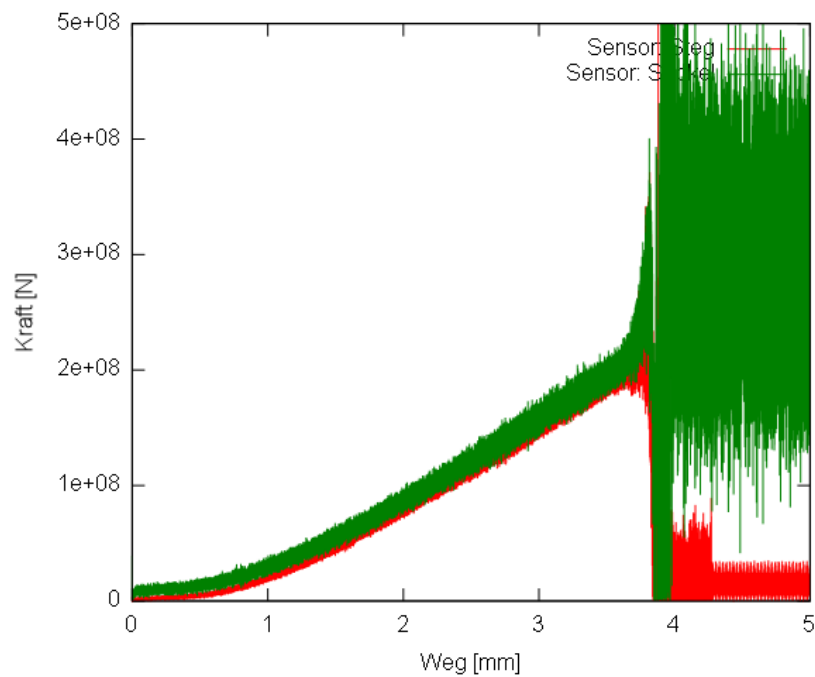


Abbildung 5.9: Kraft-Weg-Diagramm einer Simulation mit Dämpfungskoeffizient von 0 [N/(m/s)]

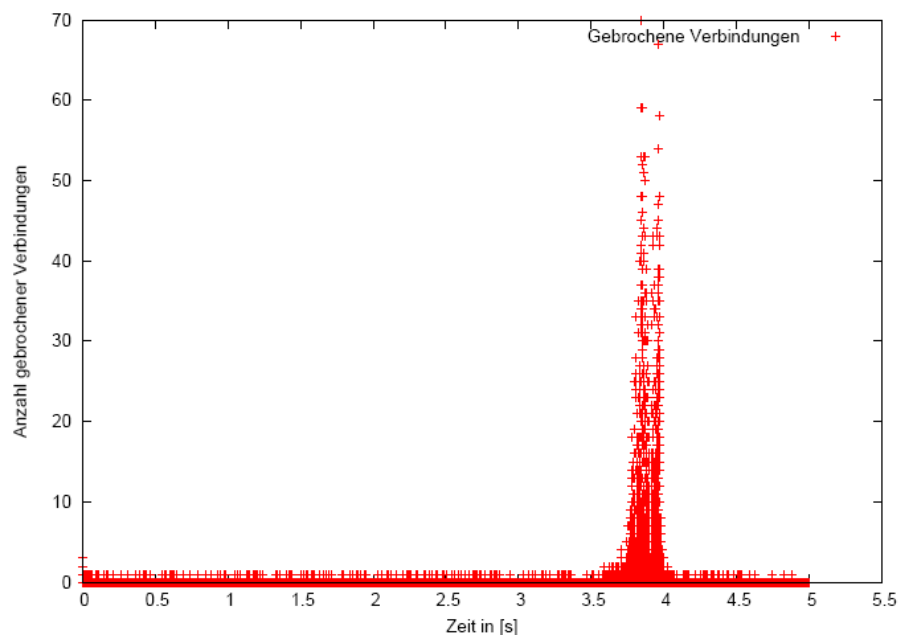


Abbildung 5.10: Anzahl der gebrochenen Verbindungen pro Zeitschritt bei einem Dämpfungskoeffizient von 0 [N/(m/s)]

Parameter	Symbol	Wert
E-Modul[N/m ²]	E	$210 \cdot 10^6$
Zeitschritt [s]	Δt	$1 \cdot 10^{-5}$
Simulationszeit [s]	t	5
Zuggeschwindigkeit [mm/s]	v_z	1
Federsteifigkeit (Druck)[N/m]	k	329700000
Federsteifigkeit (Zug)[N/m]	k	329700000
Dämpfungskoeffizient [N/(m/s)]	γ	60000
Reibungskoeffizient [-]	μ	0
Maximale Dehnung der Zugfeder [-]		2%
Suchradius für Zugfeder [mm]		2

Tabelle 5.3: Simulationsparameter bei einem Dämpfungskoeffizient von 60000 [N/(m/s)]

Abbildung 5.11: Kraft-Weg-Diagramm einer Simulation mit Dämpfungskoeffizient von 60000 [N/(m/s)]

Parameter	Symbol	Wert
E-Modul[N/m ²]	E	$210 \cdot 10^6$
Zeitschritt [s]	Δt	$1 \cdot 10^{-5}$
Simulationszeit [s]	t	5
Zuggeschwindigkeit [mm/s]	v_z	1
Federsteifigkeit (Druck)[N/m]	k	329700000
Federsteifigkeit (Zug)[N/m]	k	329700000
Dämpfungskoeffizient [N/(m/s)]	γ	90000
Reibungskoeffizient [-]	μ	0
Maximale Dehnung der Zugfeder [-]		2%
Suchradius für Zugfeder [mm]		2

Tabelle 5.4: Simulationsparameter bei einem Dämpfungskoeffizient von 90000 [N/(m/s)]

Abbildung 5.12: Kraft-Weg-Diagramm einer Simulation mit Dämpfungskoeffizient von 90000 [N/(m/s)]

Wie die ersten Simulation (Abb. 5.9) zeigt, ist bei nicht vorhandener oder relativ kleiner Dämpfung das System sehr dynamisch und beide Sensoren verzeichnen große Schwingungen. Zudem kommt es früher zu einem Bruch, wobei die Partikel ungedämpft beschleunigt werden, so dass sie den Simulationsbereich verlassen. Dabei zeigt Abb. 5.10 die Anzahl der gebrochenen Verbindungen pro Zeitschritt während der Simulation. Der Vergleich mit Abb. 5.9 lässt schließen, dass bei nicht vorhandener Dämpfung ständig Verbindungen gebrochen werden, die zu dem Rauschen in den Kurven führen. Allerdings kommt es zum Bruch erst, wenn die Anzahl der gebrochenen Verbindungen groß genug ist, sodass die simulierte Probe versagt.

Die beiden Diagramme Abb. 5.11 und Abb. 5.12 weisen keine bemerkenswerte Unterschiede auf trotz Erhöhung der Dämpfung. Grund dafür ist die quasistatische Natur der Beanspruchung mit 1 mm/s. Daher treten keine große Geschwindigkeiten auf, so dass eine Variation der Dämpfung kaum Einfluss auf dem Verlauf der Kurve hat.

5.3.2 Einfluss der Coulomb'schen Reibung

Die Coulomb'sche Reibung führt ebenso wie die Dämpfung Energie aus dem System ab. Allerdings beeinflusst die Reibung die Wechselwirkung zwischen Partikeln in tangentialer Richtung. Somit widersteht sie dem Aneinandergleiten zweier Partikel. Die Kalibrierung der Coulomb'schen Kraft kann durch Scherversuche durchgeführt werden, da wo ihre Auswirkung am besten zu beobachten ist. Wie im Falle der Dämpfungsversuche wurden in dieser Arbeit keine Scherversuche durchgeführt. Die Auswirkung der Coulomb'schen Reibung wurde an einem Zugversuch demonstriert wie die folgenden Simulationen zeigen:

Parameter	Symbol	Wert
E-Modul[N/m ²]	E	$210 \cdot 10^6$
Zeitschritt [s]	Δt	$1 \cdot 10^{-5}$
Simulationszeit [s]	t	5
Zuggeschwindigkeit [mm/s]	v_z	1
Federsteifigkeit (Druck)[N/m]	k	329700000
Federsteifigkeit (Zug)[N/m]	k	329700000
Dämpfungskoeffizient [N/(m/s)]	γ	36315
Reibungskoeffizient [-]	μ	0,3
Maximale Dehnung der Zugfeder [-]		2%
Suchradius für Zugfeder [mm]		2

Tabelle 5.5: Simulationsparameter bei einem Reibungskoeffizient von 0,3

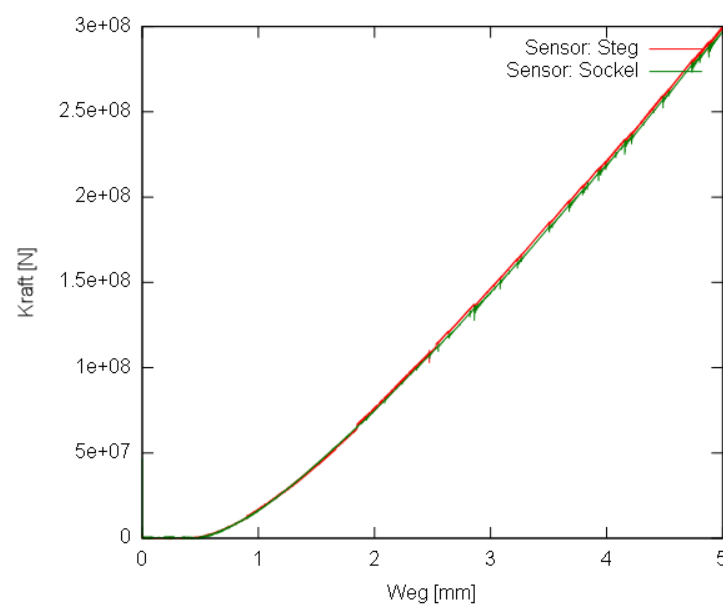


Abbildung 5.13: Kraft-Weg-Diagramm einer Simulation mit Reibungskoeffizient von 0,3

Parameter	Symbol	Wert
E-Modul[N/m ²]	E	$210 \cdot 10^6$
Zeitschritt [s]	Δt	$1 \cdot 10^{-5}$
Simulationszeit [s]	t	5
Zuggeschwindigkeit [mm/s]	v_z	1
Federsteifigkeit (Druck)[N/m]	k	329700000
Federsteifigkeit (Zug)[N/m]	k	329700000
Dämpfungskoeffizient [N/(m/s)]	γ	36315
Reibungskoeffizient [-]	μ	0,5
Maximale Dehnung der Zugfeder [-]		2%
Suchradius für Zugfeder [mm]		2

Tabelle 5.6: Simulationsparameter bei einem Reibungskoeffizient von 0,5

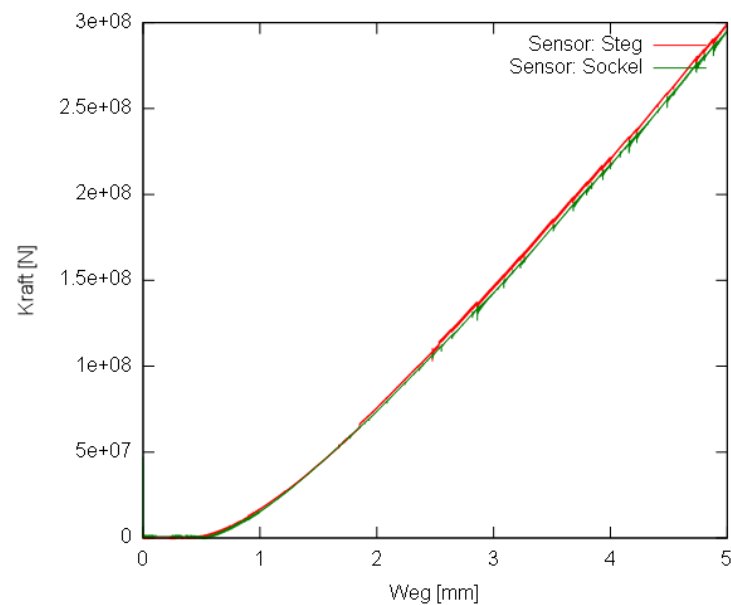


Abbildung 5.14: Kraft-Weg-Diagramm einer Simulation mit Reibungskoeffizient von 0,5

Durch Variation des Reibungskoeffizientes sind wie im Falle der Dämpfung kaum Wirkung auf den Verlauf der Kurve zu verzeichnen. Da Zugversuche durchgeführt werden ist im Falle eines harten Werkstoffes wie Stahl (das in der Simulation angenommen wurde) kaum Gleiten der Partikel vorhanden, so dass die herrschende Kraft die Zugkraft ist. Jedoch ist bei der Simulation mit einem Reibungskoeffizient von 0,5 (Abb. 5.14) ein minimaler Unterschied zwischen den beiden Sensoren festzustellen. Grund könnte die unterschiedliche Anzahl der Partikel pro Sensor sein. Der Sockel hat mehr Partikel und somit ist die gesamte Reibungskraft im Sensor höher. Diese muss wiederum vom System durch eine höhere

Zugkraft entgegengewirkt. Andererseits kann der Grund der Beständigkeit der Simulation gegenüber Änderung der Reibung in dem Abb. 2.3.3 eingeführte Reibungsmodell liegen. Gleichung 2.31 definiert die Reibung als eine von der Druckkraft abhängige Größe. Und im Zugversuch überwiegen die Zug- statt Druckkräfte.

5.3.3 Einfluss des Suchradius

Der Suchradius bestimmt, wieviel Wechselwirkungspartner ein Partikel haben kann. Je größer der Suchradius ist, desto größer die Anzahl der umgebenden Partikel, die eine Zugfeder mit dem eigentlichen Partikel aufbauen kann. Außerdem werden innerhalb des Suchradius Zugfedern gesetzt, die gleich dem Abstand zweier Partikel sind. Dies führt dazu, dass Zugfedern mit verschiedenen Längen gesetzt werden (Abb. 5.15).

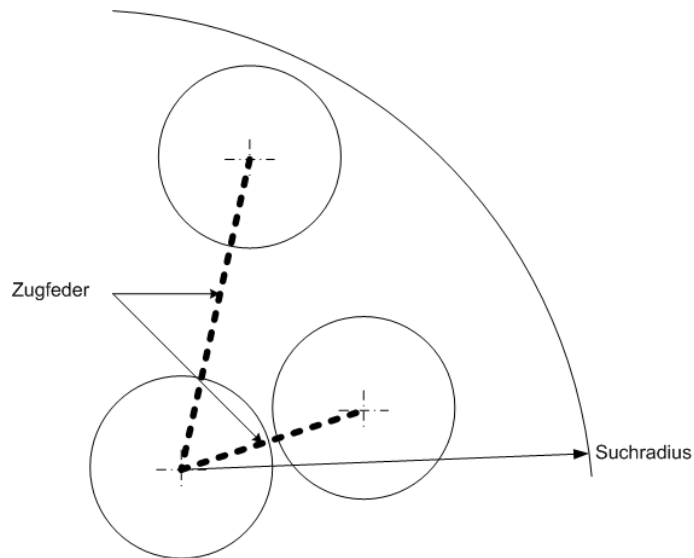


Abbildung 5.15: Partikel innerhalb eines Suchradius für Zugfeder

Jedoch besitzen die Zugfedern dieselbe prozentuelle maximale Dehnung, ab der die Verbindung gelöst wird. Dies hat zur Folge, dass die Federn verschiedene Elongationen erreichen können, bevor sie gelöst werden und somit die Zugverbindung zu den näheren Partnern eher gebrochen wird als die mit Partnern am Rande des Suchbereichs. Die äußeren Partikel wirken entsprechend wie ein Schild und umschließen die anderen Partikel.

Theoretisch sollte eine Erhöhung des Suchradius die Festigkeit des simulierten Werkstoffes erhöhen. Denn je größer der Suchradius ist, desto mehr Zugpartner können erschlossen werden. Jedoch kann die Erhöhung des Suchradius zu einer Beeinträchtigung des Einflusses der Zugfeder führen, wie oben erläutert.

Um den Einfluss der Größe des Suchradius zu untersuchen, wurden folgende Simulationen bei Variation des Suchradius durchgeführt:

Parameter	Symbol	Wert
E-Modul[N/m ²]	E	$210 \cdot 10^6$
Zeitschritt [s]	Δt	$1 \cdot 10^{-5}$
Simulationszeit [s]	t	5
Zuggeschwindigkeit [mm/s]	v_z	1
Federsteifigkeit (Druck)[N/m]	k	329700000
Federsteifigkeit (Zug)[N/m]	k	329700000
Dämpfungskoeffizient [N/(m/s)]	γ	36315
Reibungskoeffizient [-]	μ	0
Maximale Dehnung der Zugfeder [-]		2%
Suchradius für Zugfeder [mm]		1,2

Tabelle 5.7: Simulationsparameter bei einem Suchradius von 1,2

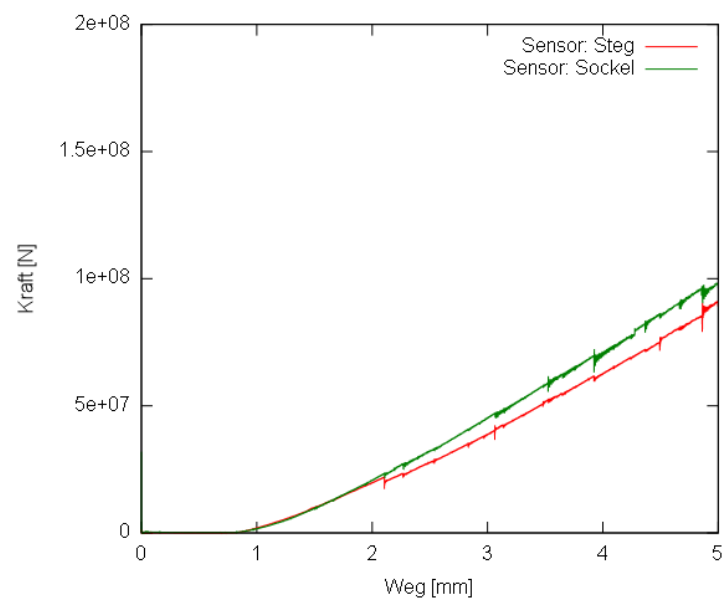


Abbildung 5.16: Kraft-Weg-Diagramm einer Simulation mit einem Suchradius von 1.2

Aus den Abbildungen 5.16, 5.17, 5.18 geht hervor, dass eine Erhöhung des Suchradius tatsächlich zu einer Erhöhung der Festigkeit bzw. des E-Moduls eines simulierten Werkstoffes führt. Daraus wird geschlossen, dass zusätzlich zu den Modellparametern auch der Suchradius kalibriert werden muss. Jedoch wie die Diagramme zeigen, bei kleinen Suchradien entstehen Differenzen zwischen den beiden Sensoren. Der Sensor am Sockel verzeichnet ein höheres E-Modul (Abb. 5.17). Bekannt ist, dass der Sensor am Sockel mehr Partikel besitzt als am Steg. Deswegen ist denkbar, dass dies der Grund dafür ist. Der Fakt, dass die beiden Sensoren verschiedene E-Module bei kleinen Suchradien, zeigen ist jedoch physika-

Parameter	Symbol	Wert
E-Modul[N/m ²]	E	$210 \cdot 10^6$
Zeitschritt [s]	Δt	$1 \cdot 10^{-5}$
Simulationszeit [s]	t	5
Zuggeschwindigkeit [mm/s]	v_z	1
Federsteifigkeit (Druck)[N/m]	k	329700000
Federsteifigkeit (Zug)[N/m]	k	329700000
Dämpfungskoeffizient [N/(m/s)]	γ	36315
Reibungskoeffizient [-]	μ	0
Maximale Dehnung der Zugfeder [-]		2%
Suchradius für Zugfeder [mm]		1,3

Tabelle 5.8: Simulationsparameter bei einem Suchradius von 1,3

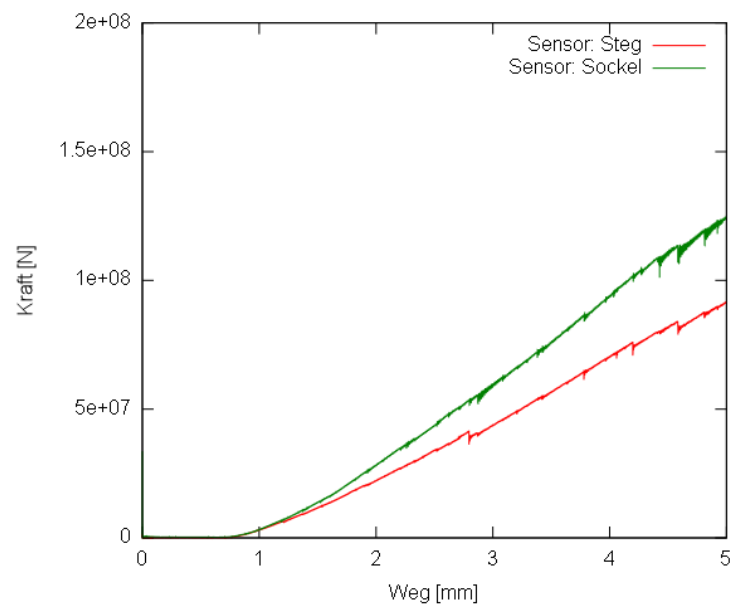


Abbildung 5.17: Kraft-Weg-Diagramm einer Simulation mit einem Suchradius von 1,3

lisch nicht vertretbar. Eine genaue Untersuchung dieses Effektes ist daher notwendig.

Parameter	Symbol	Wert
E-Modul[N/m ²]	E	$210 \cdot 10^6$
Zeitschritt [s]	Δt	$1 \cdot 10^{-5}$
Simulationszeit [s]	t	5
Zuggeschwindigkeit [mm/s]	v_z	1
Federsteifigkeit (Druck)[N/m]	k	329700000
Federsteifigkeit (Zug)[N/m]	k	329700000
Dämpfungskoeffizient [N/(m/s)]	γ	36315
Reibungskoeffizient [-]	μ	0
Maximale Dehnung der Zugfeder [-]		2%
Suchradius für Zugfeder [mm]		1,5

Tabelle 5.9: Simulationsparameter bei einem Suchradius von 1,5

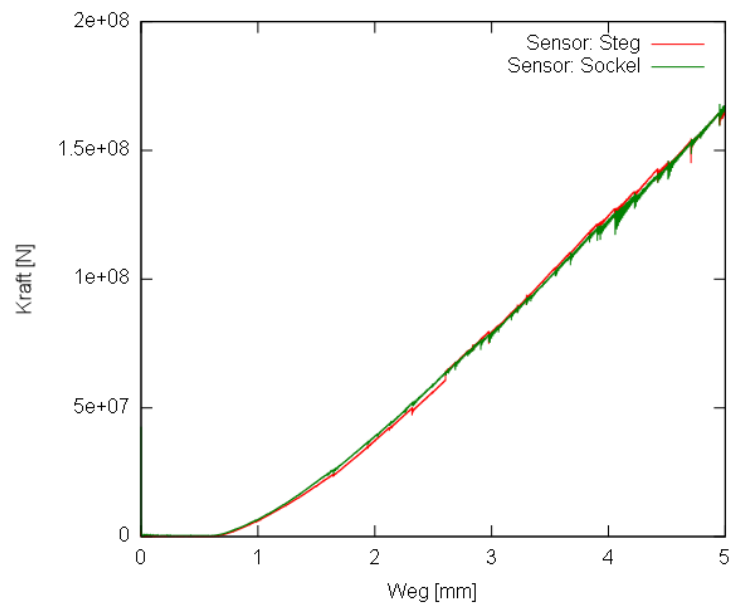


Abbildung 5.18: Kraft-Weg-Diagramm einer Simulation mit einem Suchradius von 1,5

5.3.4 Einfluss unterschiedlicher Zug- und Druckfeder

In Zugversuchen bestimmen zum größten Teil die Zugkräfte das Verhalten des Materials, jedoch kommt es in der Probe zu Kollisionen zwischen den Partikel, die zusammen gezerrt werden. Bisher wurden immer Zug- und Druckfeder gleichgesetzt. In den folgenden Simulationen werden verschiedene Werte eingegeben um zu zeigen, welchen Einfluss dies haben kann.

Parameter	Symbol	Wert
E-Modul[N/m ²]	E	$210 \cdot 10^6$
Zeitschritt [s]	Δt	$1 \cdot 10^{-5}$
Simulationszeit [s]	t	5
Zuggeschwindigkeit [mm/s]	v_z	1
Federsteifigkeit (Druck)[N/m]	k	400000000
Federsteifigkeit (Zug)[N/m]	k	329700000
Dämpfungskoeffizient [N/(m/s)]	γ	36315
Reibungskoeffizient [-]	μ	0
Maximale Dehnung der Zugfeder [-]		2%
Suchradius für Zugfeder [mm]		2

Tabelle 5.10: Simulationsparameter bei einer Druckfederkonstante von 400000000 N/m

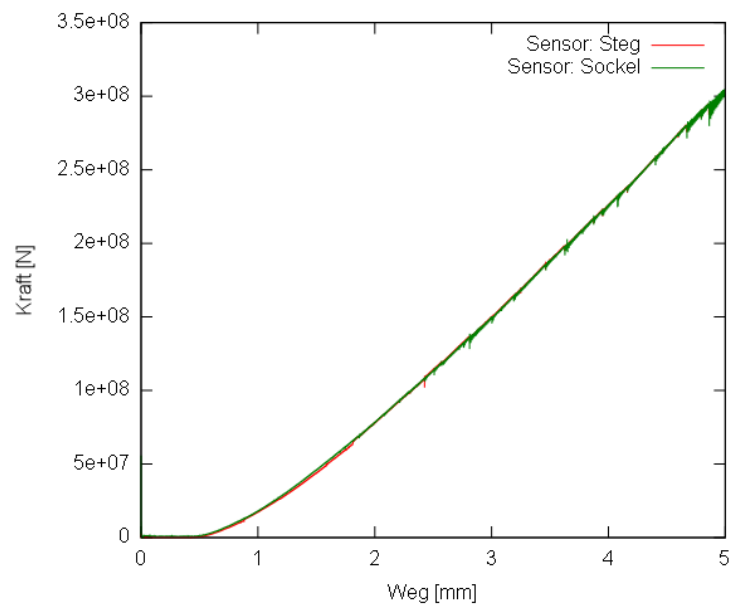


Abbildung 5.19: Kraft-Weg-Diagramm einer Simulation mit einer Druckfederkonstante von 400000000 N/m

Parameter	Symbol	Wert
E-Modul[N/m ²]	E	$210 \cdot 10^6$
Zeitschritt [s]	Δt	$1 \cdot 10^{-5}$
Simulationszeit [s]	t	5
Zuggeschwindigkeit [mm/s]	v_z	1
Federsteifigkeit (Druck)[N/m]	k	600000000
Federsteifigkeit (Zug)[N/m]	k	329700000
Dämpfungskoeffizient [N/(m/s)]	γ	36315
Reibungskoeffizient [-]	μ	0
Maximale Dehnung der Zugfeder [-]		2%
Suchradius für Zugfeder [mm]		2

Tabelle 5.11: Simulationsparameter bei einer Druckfederkonstante von 600000000 N/m

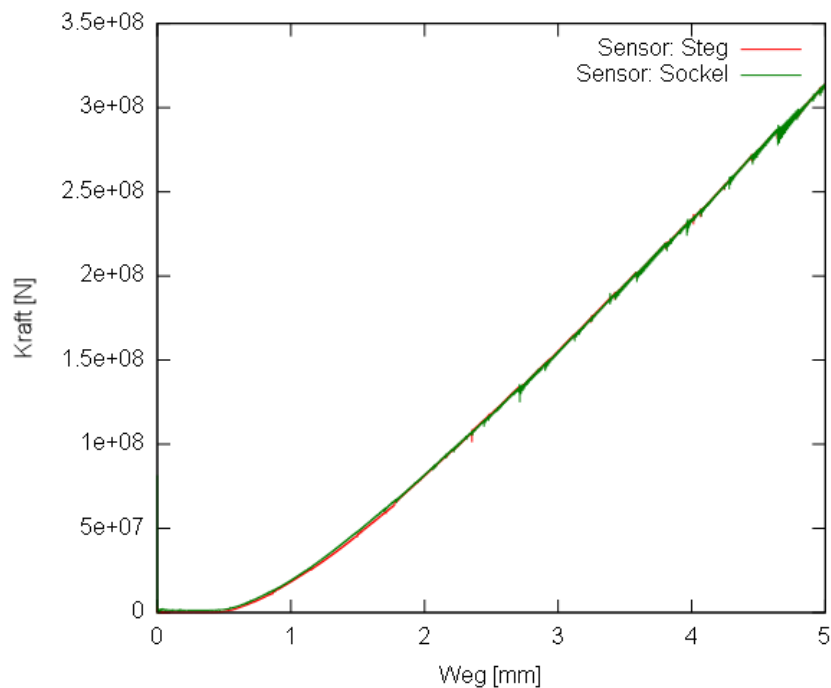


Abbildung 5.20: Kraft-Weg-Diagramm einer Simulation mit einer Druckfederkonstante von 600000000 N/m

Beide Kurven in Abb. 5.19 und 5.20 weisen keine großen Unterschiede auf, außer eine minimale Erhöhung der Festigkeit. Dies ist eine Bestätigung, dass in dem Zugversuch die Zugkräfte maßgeblich das Verhalten des Materials abbilden und die Druckkräfte einen vernachlässigbaren Einfluss haben.

5.3.5 Einfluss der Plastizität

Um ein viskoelastisches Verhalten polymerer Werkstoffe zu ermöglichen, wurde das in Abb. 4.1.2 erarbeitete Konzept realisiert. Dabei können im Laufe der Simulation Partikel Verbindungen verlieren und zeitgleich neue eingehen. Allerdings liefert die Simulation bei aktiviertem Plastizitätsverhalten keine Ergebnisse, da sie nach kurzer Zeit abstürzt. Grund dafür sind die Nachbarschaftslisten, die schnell voll werden. Ein besseres Verständnis für diesen Vorgang konnte in letzter Zeit nicht erreicht werden, so dass dieses Problem weiterhin besteht und vermutlich programmieretechnisch gelöst werden kann.

Kapitel 6

Fazit und Ausblick

In dieser Arbeit wurde angestrebt, unter Nutzung der Diskrete Elemente Methode das Verhalten realer elastischer und viskoelastischer Werkstoffe nachzubilden, in dem Modellparameter kalibriert werden. Aufbauend auf einem von Fraunhofer Institut UMSICHT entwickelten DEM-Code wurden DEM-Modelle erstellt, die aus Kugelelementen bestehen. Aus diesen Modellen wurden Versuchsobjekte für verschiedene Simulationsarten generiert. Hierzu wurden die Geometrien der Objekte mathematisch beschrieben, um sie mit Hilfe von eigens entwickelten Routinen sowie Initialisierungsdateien auf DEM-Modelle anzuwenden. Damit können Zugproben für metallische Werkstoffe und Polymere entsprechend den DIN-Normen, sowie Versuchsobjekte für Scherversuche, Kerbschlagbiegeversuche und Dämpfungsversuche erstellt werden.

Der zeitliche Rahmen dieser Arbeit beschränkte den Umfang der durchführbaren Simulationen, so dass der Fokus auf die Durchführung von Zugversuche gerichtet wurde. Hierbei wurden sowohl Parameter als auch Probengeometrie für metallische Werkstoffe in Betracht bezogen. Da Zugproben für Polymere einen wesentlich kleineren Querschnitt besitzen, als Proben für metallische Werkstoffe, wurde so der Einfluss der Kugelanzahl auf die Simulationsergebnisse verringert. Da eine hohe Anzahl numerischen Simulationen durchgeführt werden musste, wurde ergänzend eine Versuchsumgebung entwickelt, die durch einen SHELL-Skript und Initialisierungsdateien gesteuert werden kann. Damit können alle Arten der genannten Simulationen sowie die Dokumentation ihrer Ergebnisse ohne Eingriff in den Quellcode erfolgen. Dabei wurde großer Wert darauf gelegt, die neuentwickelten Routinen durch Aufrufmethoden in den vorhandenen Code zu integrieren. Dadurch wird die Stabilität und Flexibilität des Codes wesentlich erhöht.

Um die Simulationen auszuwerten war es notwendig, die wirkenden Kräfte in den Proben zu messen. Dies erforderte die Programmierung von Kraftsensoren. Es wurde ein Verfahren implementiert, um die Kräfte an einem beliebigen Querschnitt ermitteln zu können. Da ein DEM-Modell aufgrund der verwendeten Kugelgeometrie die Definition ebener Flächen

nicht zulässt, um an dieser die Kraft zu messen, wurde eine fiktive Fläche beschrieben, die zwei ausreichend große Bereiche separiert. Anschließend wurden sämtliche Wechselwirkungen erfasst, die zu zwei Partnern aus unterschiedlichen Bereichen gehören. Es stellte sich heraus, dass im vorhandenen Code lediglich die Kugelelemente identifiziert werden, wobei die Wechselwirkungen nur dazu dienen, die Bewegungsgleichungen zu lösen, um die Positionen der Partikel zu bestimmen. Daher wurde ein Ansatz entwickelt, wie diese Wechselwirkungen identifiziert und verwaltet werden können. Ein solcher Ansatz stellte aus programmieretechnischer Sicht eine große Herausforderung dar. Die Entwicklung dieses Ansatzes hat den größten Teil der verfügbaren Zeit in Anspruch genommen.

Das Ergebnis ist eine neue Plattform, die eine Betrachtung sowohl der Kugelelemente, als auch deren Wechselwirkungen ermöglicht. So können Aussagen über die herrschenden Kräfte im Modell getroffen sowie deren Verlauf dokumentiert und ausgegeben werden. Die ersten Simulationen mit der entwickelten Versuchsumgebung führten zu einer großen Anzahl komplizierter Fragestellungen bezüglich der Umgebung, die in einem iterativen Vorgang beantwortet wurden. Teilweise mussten die Konzepte für die Erfassung von Wechselwirkungen und dem Messen von Kräften überarbeitet werden, um die Versuchsumgebung zu stabilisieren und verdeckte Fehler zu ermitteln. Das Problem der Anfangsüberlappung der Kugelelemente konnte programmieretechnisch nicht behoben werden. Es wurden Versuche unternommen, dieses Problem durch eine Unterdrückung der Überlappung zu beseitigen. Dies führte jedoch nicht zu befriedigenden Ergebnissen. Als Lösungsansatz wurde daher die Durchführung einer Relaxierung gewählt, um den Einfluss der Überlappungen zu vermindern.

Der zeitliche Rahmen dieser Arbeit war nicht ausreichend, um die oben gewünschte Kalibrierung durchzuführen, sodass das Verhalten realer Materialien simuliert werden kann. Jedoch wurde eine Versuchsumgebung geschaffen, womit der Benutzer durch einen Steuerskript und Initialisierungsdateien die Simulationen starten und Ergebnisse dokumentieren kann. Da die Simulationen viel Zeit in Anspruch nehmen, können zusätzliche SHELL-Skripte eine Reihe von Simulationen sequentiell ohne Eingriff eines Benutzers starten. In Verbindung mit den am Anfang dieses Kapitels aufgeführten statistischen Optimierungsmethoden können diese Skripte selbstständig die Modellparameter entsprechend dem Optimierungsverfahren variieren, Simulationen starten und Ergebnisse auswerten, sodass eine automatische Kalibrierung denkbar ist.

So stellt das erzielte Ergebnis der Diplomarbeit ein vorläufiges Zwischenresultat dar, welches als Grundlage zukünftiger wissenschaftlicher Tätigkeiten fungieren kann.

Literaturverzeichnis

- [1] CHENG, Y. P., Y. NAKATA und M. D. BOLTON: *Discrete element simulation of crushable soil*. Geotechnique, 53(7):633–641, 2003.
- [2] CUNDALL, P. A. und O. D. L. STRACK: *A Discrete numerical model for granular assemblies*. Geotechnica, 29:47–65, 1979.
- [3] FOERSTER, S. F., M. Y. LOUGE, H. CHANG und K. ALLIA: *Measurements of the Collisions Properties of Small Spheres*. Phys. Fluids, 6(3):1108–1115, 1994.
- [4] HENRICH, B.: *Partikelbasierte Simulationmethoden in Pulvertechnologie und Nanofluidik*. Dissertation, Universität Freiburg, 2007.
- [5] JOHNSON, K.: *Contact Mechanics*. Cambridge University Press Cambridge, 1989.
- [6] KHARAZ, A. H., D. A. GORHAM und A. D. SALMAN: *An Experimental Study of the Elastic Rebound of Spheres*. Powder Technol., 120:181–291, 2001.
- [7] KRUGGEL-EMDEN, H.: *Analysis and Improvement of the time-driven Discrete Element Method*. Dissertation, Ruhr-Universität Bochum, Bochum, 2007.
- [8] KRUGGEL-EMDEN, H., E. SIMSEK, S. WIRTZ und V. SCHERER: *A comparative numerical study of partical mixing on different grate designs through the Discrete Element Method*. Journal of Pressure Vessels Technology, 129:593–600, 2007.
- [9] KRUGGEL-EMDEN, H., S. WIRTZ und V. SCHERER: *An analytical solution of different configurations of the linear viscoelastic normal and frictional-elastic tangential contact model*. Chemical Engineering Science, 62, 2007.
- [10] KUMAR, R. S. und R. TALREJA: *A continuum damage model for linear viscoelastic composite material*. Mechanic of Materials, 35:463–480, 2003.
- [11] KUN, F., M. H. COSTA, R. N. C. FILHO, J. S. A. JR., J. B. SOARES, S. ZAPPERI und H. J. HERRMANN: *Fatigue failure of disordered materials*. J. Stat. Mech., S. 2003, 2007.

- [12] LIMBACH, H.: *ESPRreSO- An Extensible Simulation Package for Research on Soft Matter Systems*. Techn. Ber., Max-Planck-Institut für Materialforschung, Mai 2005.
- [13] LUDING, S., M. LÄTZEL, W. VOLK, S. DIEBELS und H. J. HERRMANN: *From discrete element simulations to a continuum model*. Comput. Methods Appl. Mech. Eng., 191:21–28, 2001.
- [14] MAIO, F. P. D. und A. D. RENZO: *Analytical Solution for the Problem of Frictional-Elastic Collisions of Spherical Particles Using the Linear Model*. Chem. Eng. Sci., 59:3461–3475, 2004.
- [15] MAW, N., J. R. BARBAR und J. N. FAWCETT: *The Oblique Impact of Elastic Spheres*. Wear, 38:101–114, 1976.
- [16] MAY, I. M. und N. M. M. AZEVEDO: *A rigid discrete element formulation for modelling fracture in concrete*. Euromech, Modelling of Concrete Cracking, (460), 2005.
- [17] MÖLDERS, N.: *Grundlagen der Entwicklung eines DEM-Codes für Werkstoffmechanische Anwendungen*. Diplomarbeit, Ruhr-Universität Bochum, d, June 2008.
- [18] NIEMEIER, W.: *Ausgleichsrechnung*. De Gruyter Lehrbuch, Berlin, 1 Aufl., 2002.
- [19] POTAPOV, A. V. und C. S. CAMPBELL: *Computer Simulation of Hopper Flows*. Phys. of. Fluids, 8:2884–2894, 1996.
- [20] ROBERTSON, D. und M. D. BOLTON: *DEM simulations of crushable grains and soils*. Powder and Grains, 2001.
- [21] SCHÄFER, J., S. DIPPEL und D. E. WOLF: *Forces Schemes in Simulations of Granular Materials*. J.Physics I, 6(1):5–20, 1996.
- [22] SCHWETLIK, M. und H. KRETSCHMAR: *Numerische Verfahren für Naturwissenschaftler und Ingenieure*. Fachbuchverlag, Leipzig, 1 Aufl., 1991.
- [23] SLACK, T. S., N. RAJE, F. SADEGHI, G. DOLL und M. R. HOEPRICH: *EHL Modeling for Non-homogeneous Materials: The Effect of Material Inclusions*. J. Tribol, 2006.
- [24] THEUERKAUF, J., S. DHODAPKAR, K. MANJUNATH, K. JACOB und T. STEINMETZ: *Applying the Discrete Element Method in Process Engineering*. Chem. Eng. Technol., 26(2):157, 2003.
- [25] TOMAS, J.: *Zur Mechanik trockener kohäsiver Schüttgüter*. Schüttgut, 8:522–537, 2002.
- [26] VERSPUI, M. und ANDERE.: *Simulation model for the erosion of brittle materials*. Wear, S. 436–443, 1999.

-
- [27] WONISCH, A.: *Entwicklung und Anwendung partikelbasierter Simulationstechniken für die Modellierung von Umordnungseffekten und Anisotropieentwicklung in pulvertechnologischen Prozessen*. Dissertation, Universität Freiburg, Dezember 2008.
- [28] ZENG, D., N. KATSUBE und W. SOBOYEJO: *Discrete modeling of transformation toughening in heterogeneous materials*. *Mechanic of Materials*, 36:1057–1071, 2004.

Abbildungsverzeichnis

2.1	Grundarten der mechanischen Beanspruchung	7
2.2	Spannungen am dünnwandigen Rohr	8
2.3	Kraft-Verlängerungsdiagramm, schematisch	10
2.4	Spannungs-Dehnungskurve eines duktilen Werkstoffes mit (links: ausgeprägter Streckgrenze, Rechts: mit Streckgrenzeneffekt)	12
2.5	Rheologische Modelle	15
2.6	Überlappung zweier Kugelelemente	17
3.1	Füllen eines Quaders mit 100.000 Kugeln	23
3.2	Fertiges Modul	24
3.3	Gedrehtes Modul	25
3.4	Runde Probe für metalische Werkstoffe, Form B	25
3.5	Zylinderkoordinate q	26
3.6	Kontur des Stegs des Zugstabes	26
3.7	Konstruktion der Abrundung des Zugstabes	27
3.8	DEM-Zugprobe für metallische Werkstoffe	27
3.9	Zugstab Geometrie für Polymeren nach DIN EN ISO 527	28
3.10	Bereiche für die Kontur der Zugprobe für Polymere	29
3.11	Konstruktion der abgerundeten Bereichen	30
3.12	Zugprobe für Polymere	31
3.13	Kugel-Modell für Dämpfungsveruche	32
4.1	Programmablauf	34
4.2	Konzept der Speicherung von Verbindungen sowie deren Beziehungen (Partikelpaar<->Verbindung)	35

4.3	Vorgehensweise für die Erfassung und Speicherung von Wechselwirkungen	37
4.4	Eintragung einer Partikel, die ihre erste Verbindung eingeht	38
4.5	Eintragung einer neuen Verbindung	38
4.6	Regeln für Trennen oder Setzen einer Zugkraft	40
4.7	Querschnitt einer Zugprobe	41
4.8	Erfassung der Kräfte, die durch eine Fläche gehen	42
4.9	Bestimmung der Klemmzone einer Zugprobe	43
4.10	Verteilung der Kraftsensoren auf einer Zugprobe	45
4.11	Wegmessung an einer Zugprobe	45
5.1	Vereinfachung des Zugstabes zu einem einzigen Feder-Dämpfer-System	48
5.2	Kraft-Weg-Diagramm einer Zugprobe mit geordneten Kugelementen und Startparametern	53
5.3	Zugversuch einer Zugprobe mit geordneten Kugelementen und startparametern	53
5.4	Unter Schwerkraft belastete Kugelemente eines Moduls	55
5.5	Trennung der Verbindungspartner bei dem Heraus schneiden einer Versuchsprobe	56
5.6	Explodierende Zugprobe	56
5.7	Einfluss der Überlappungen auf einen Zugversuch	57
5.8	Zugversuch für eine relaxierte Probe	58
5.9	Kraft-Weg-Diagramm einer Simulation mit Dämpfungskoeffizient von 0 [N/(m/s)]	60
5.10	Anzahl der gebrochenen Verbindungen pro Zeitschritt bei einem Dämpfungskoeffizient von 0 [N/(m/s)]	61
5.11	Kraft-Weg-Diagramm einer Simulation mit Dämpfungskoeffizient von 60000 [N/(m/s)]	61
5.12	Kraft-Weg-Diagramm einer Simulation mit Dämpfungskoeffizient von 90000 [N/(m/s)]	62
5.13	Kraft-Weg-Diagramm einer Simulation mit Reibungskoeffizient von 0,3	64
5.14	Kraft-Weg-Diagramm einer Simulation mit Reibungskoeffizient von 0,5	65
5.15	Partikel innerhalb eines Suchradius für Zugfeder	67
5.16	Kraft-Weg-Diagramm einer Simulation mit einem Suchradius von 1.2	68
5.17	Kraft-Weg-Diagramm einer Simulation mit einem Suchradius von 1.3	69

5.18 Kraft-Weg-Diagramm einer Simulation mit einem Suchradius von 1.5	70
5.19 Kraft-Weg-Diagramm einer Simulation mit einer Druckfederkonstante von 400000000 N/m	71
5.20 Kraft-Weg-Diagramm einer Simulation mit einer Druckfederkonstante von 600000000 N/m	72

Anhang A

Verwendete Formelzeichen

E	E-Modul	$[N/m^2]$
F	Kraft	$[N]$
\mathbf{F}^n	Normalkraft	$[N]$
\mathbf{F}_{el}	Federkraft in Normalrichtung	$[N]$
\mathbf{F}_{diss}	Dämpfungskraft in Normalrichtung	$[N]$
A	Querschnittsfläche	$[mm^2]$
A_0	Anfangsquerschnitt	$[mm^2]$
M_b	Biegemoment	$[Nm]$
M_t	Torsionsmoment	$[Nm]$
W_b	Widerstandsmoment bei Biegung	$[m^3]$
W_t	Widerstandsmoment bei Torsion	$[m^3]$
l_0	Anfangslänge	$[mm]$
R_p	Fließrenze	$[mm]$
R_e	Elastizitätgrenze	$[mm]$
R_m	Zugfestigkeit	$[mm]$
S_g	Gleichmaßdehnung	$[-]$
S	Bruchdehnung	$[-]$
Z	Brucheinschnürung	$[-]$
N	Anzahl der Diskreten Elementen	$[-]$
$\mathbf{F}_{i,j}$	Resultierender Kraft	$[N]$
\mathbf{F}^n	Normalkraft	$[N]$
\mathbf{F}^t	Tangentialkraft	$[N]$
$\mathbf{M}_{i,j}$	Resultierendes Drehmoment	$[N]$
$\mathbf{x}_{i,j}$	Ortsvektor	$[m]$
\mathbf{v}^n	Normalgeschwindigkeit	$[m/s]$
\mathbf{v}_0	Anfangsgeschwindigkeit	$[m/s]$
\mathbf{v}^t	Tangentialgeschwindigkeit	$[m/s]$

m_i	Masse	[Kg]
$\mathbf{J}_{i,j}$	Trägheitsmoment	[Kgm ²]
k^n	Federsteifigkeit in Normalrichtung	[N/m]
k^t	Federsteifigkeit in Tangentialrichtung	[N/m]
t	Tangential Einheitsvektor	[–]
n	Normal Einheitsvektor	[–]
t^n	Kollisionsdauer	[s]
$G_{i,j}$	Schubmodul	[N/mm ²]
D	Dämpfungsmaß	[–]
c	Schallgeschwindigkeit	[m/s]
Δt	Zeitschritt	[s]

Griechische Buchstaben

δ	Überlappung	[mm]
Δl	Längenänderung	[mm]
ϵ_0	Wahre Dehnung	[–]
ϵ	Technische Dehnung	[–]
γ^n	Dämpfungskoeffizient in Normalrichtung	[N/(m/s)]
κ	Quotient der tangential zu der normalensteifigkeit	[–]
μ	Coulomb'sche Reibung	[–]
$\omega_{i,j}$	Kreisgeschwindigkeit	[s ⁻¹]
ω_0	Eigenfrequenz	[s ⁻¹]
σ	Wahre Spannung	[N/mm ²]
σ_0	Technische Spannung	[N/mm ²]
$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$	Hauptspannungen	[N/mm ²]
σ_h	Hydrostatische Normalspannung	[N/mm ²]
σ_v	Vergleichsspannung	[N/mm ²]
τ_{max}	Maximale Schubspannung	[N/mm ²]
ξ	Relative Verschiebung	[mm]
$\nu_{i,j}$	Querkontraktionszahl	[–]
ζ, η	Beiwerte nach Hertz für die Berührung gekrümmter Oberflächen	[–]
χ	Krümmung	[–]
ς	Dämpfungsfaktor	[–]
$\lambda_{1,2}$	Eigenwerte	[–]
ρ	Dichte	[Kg/m ³]

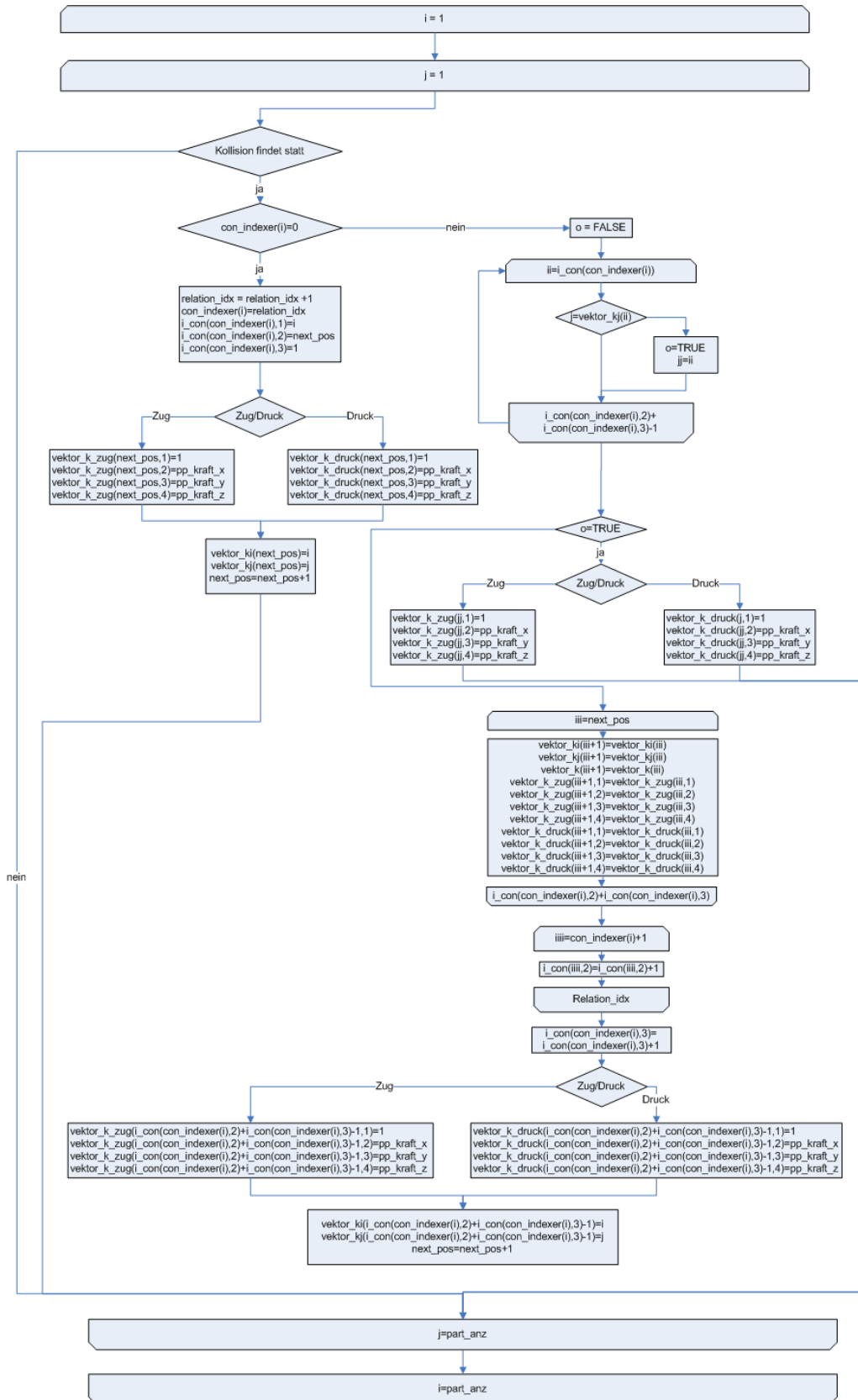
Abkürzungen

<i>DEM</i>	Diskrete Elemente Methode
<i>FEM</i>	Finite Elemente Methode
<i>FVM</i>	Finite Volumen Methode
<i>FEA</i>	Finite Element Analysis
<i>BEM</i>	Boundary Element Methode
<i>MD</i>	Molekulardynamik
<i>DPD</i>	Dissipative Partikel Dynamik
<i>SPH</i>	Smoothed Particle Hydrodynamics
<i>DMS</i>	Dehnmessstreifen
<i>MCS</i>	Monte-Carlo-Simulation

Anhang B

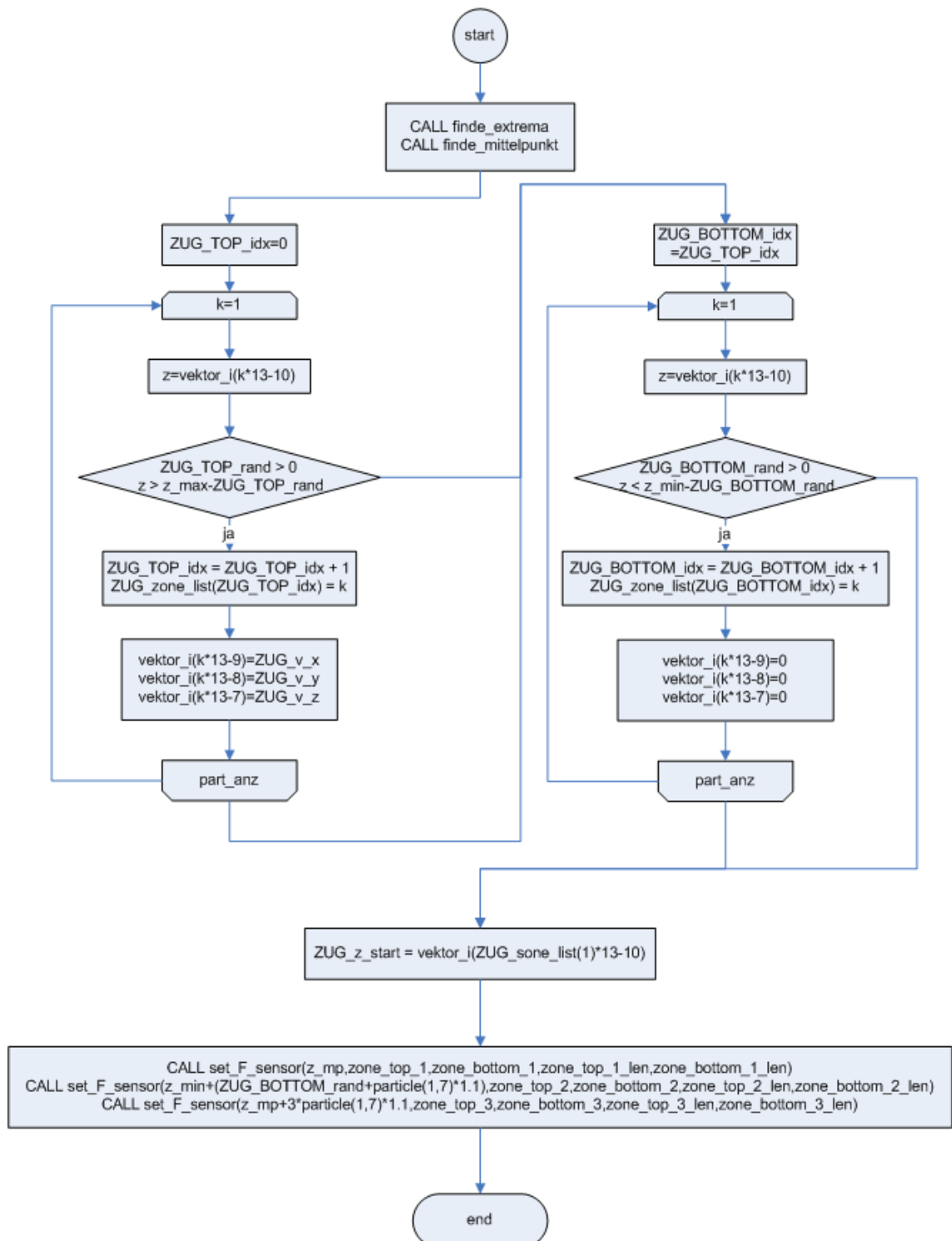
Relavante Routinen

B.1 Hinzufügen einer Wechselwirkung



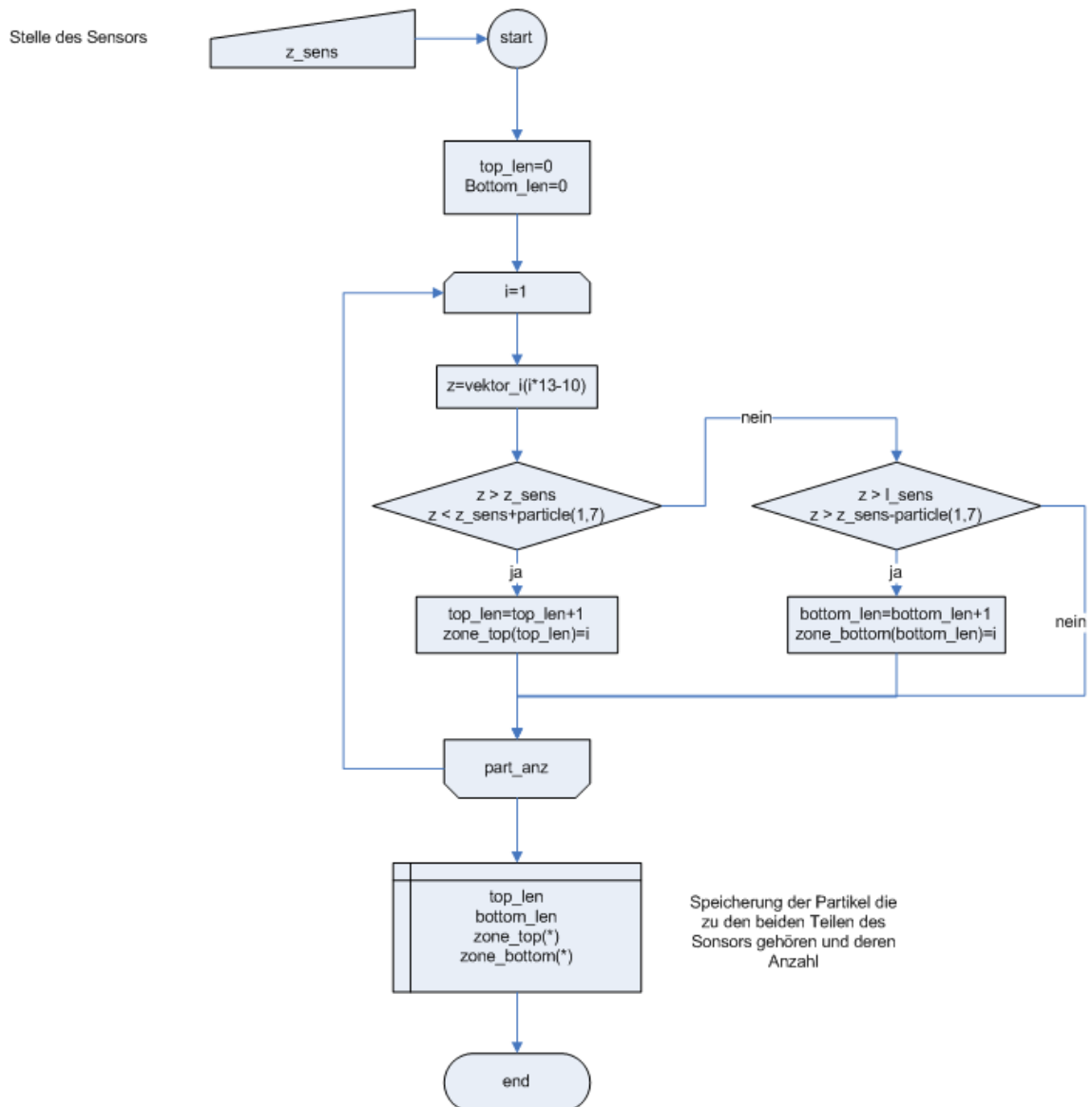
B.2 Setzen eines Zugversuches

set_zugversuch



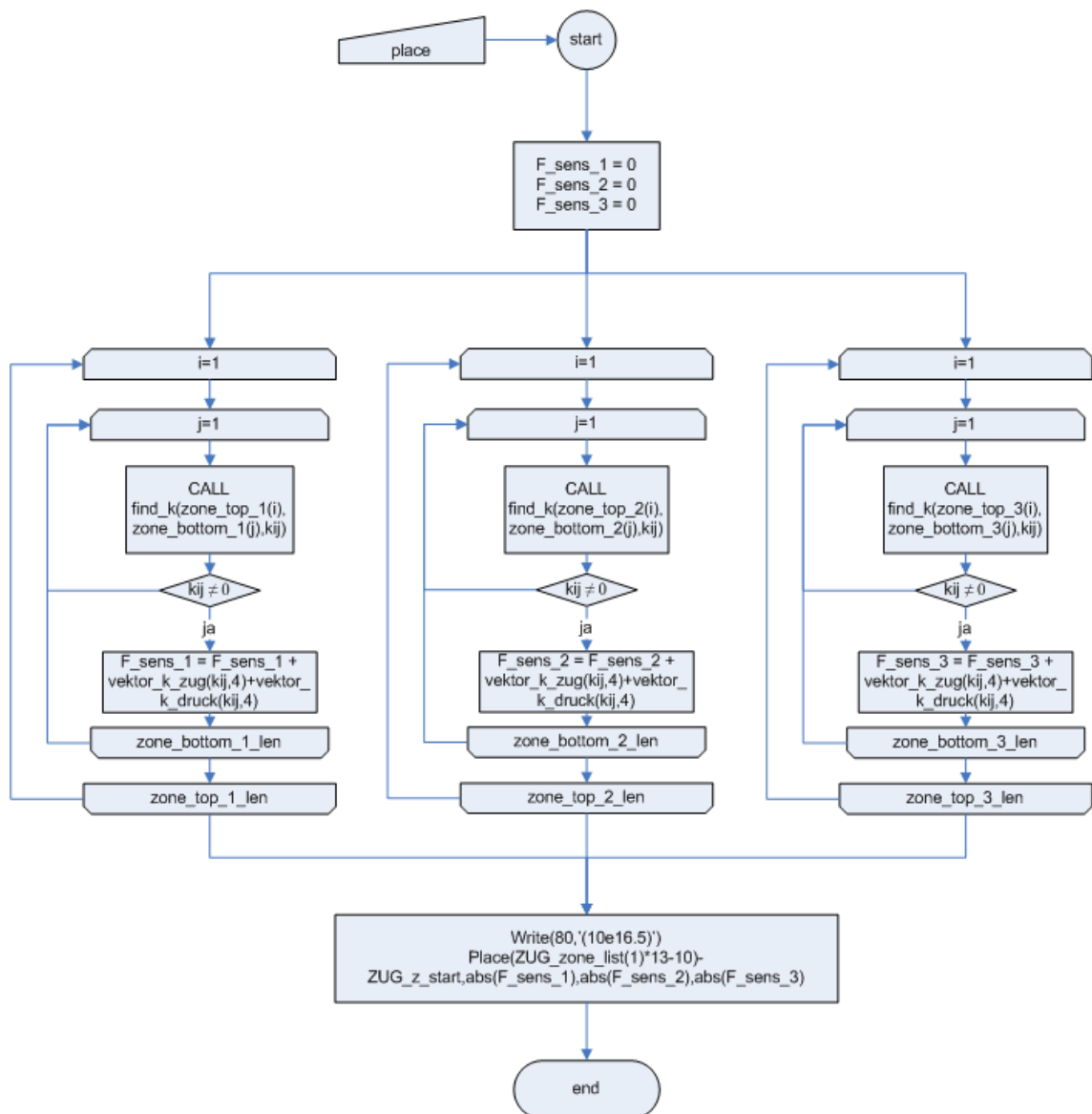
B.3 Setzen eines Kraftsensors

set_F_sensor



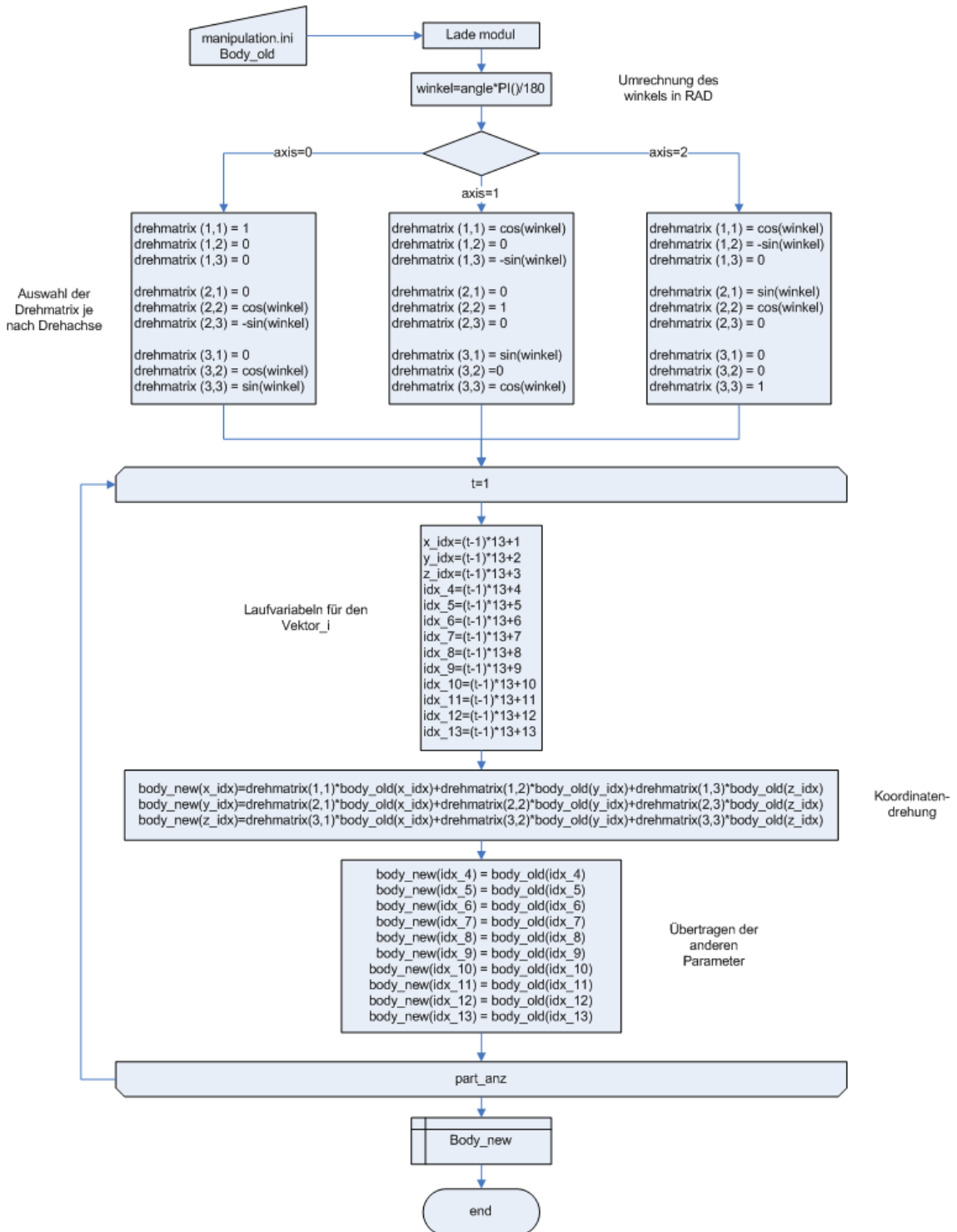
B.4 Durchführung der Kraftmessung

ZUG_F_messung



B.5 Körperdrehung

Körperdrehung



Anhang C

Initialisierungsdatei für die Einstellungen der Versuchsumgebung

```
-----+-----+-----MANIPULATION
21      | -- | aktion      --00:keine, 01:drehung, 11:CUT Zugstab Stahl, 12:CUT Zugstab Kunststoff,
      13: CUT Kerbschlag, 21: Zugversuch, 22: Kerbschlagversuch
-----+-----+-----DREHUNG
1       | -- | axis      --0:x-Achse, 1:y-Achse, 2:z-Achse
90      | ° | angle      --0:Drehwinkel in Grad
-----+-----+-----ZUGSTAB STAHL
14      | mm | zug_stahl_d --
17      | mm | zug_stahl_h --
10      | mm | zug_stahl_r --
20      | mm | zug_stahl_b --
-----+-----+-----ZUGSTAB PLASTE
100     | mm | zug_plaste_l --
30      | mm | zug_plaste_ls --
5       | mm | zug_plaste_b --
40      | mm | zug_plaste_bk --
20      | mm | zug_plaste_r1 --
20      | mm | zug_plaste_r2 --
2       | mm | zug_plaste_a --
-----+-----+-----KERBSCHLAG
100     | mm | kerb_a --Länge der Probe
50      | mm | kerb_b --Höhe der Probe
30      | mm | kerb_c --Tiefe der Probe
10      | mm | kerb_h --Höhe bis zur Kerbe
5       | mm | kerb_r --Radius der Kerbe
-----+-----+-----DAMPINGVERSUCH
40      | mm | damp_r --Radius der Kugel fuer Daempungsversuch
-----+-----+-----SCHERVERSUCH
70      | mm | scher_x --Länge
30      | mm | scher_y --Tiefe
```

```
10      | mm | scher_z --Höhe
-----+-----+-----ZUGVERSUCH
0      | mm/s| ZUG_v_x -- Zuggeschwindigkeiten in x-Richtung
0      | mm/s| ZUG_v_y -- Zuggeschwindigkeiten in y-Richtung
1      | mm/s| ZUG_v_z -- Zuggeschwindigkeiten in z-Richtung
5      | mm | ZUG_TOP_rand -- Dicke der spannzone
5      | mm | ZUG_BOTTOM_rand -- Dicke der spannzone
-----+-----+-----SCHERVERSUCH
0      | mm/s| SCHER_v_x -- Zuggeschwindigkeiten in x-Richtung
0      | mm/s| SCHER_v_y -- Zuggeschwindigkeiten in y-Richtung
0      | mm/s| SCHER_v_z -- Zuggeschwindigkeiten in z-Richtung
10     | mm | SCHER_TOP_rand -- Dicke der spannzone
10     | mm | SCHER_BOTTOM_rand-- Dicke der spannzone
```

Anhang D

SHELL-Skript zur Simulationssteuerung

```
#!/bin/bash

echo '*****'
echo
echo ***Geben Sie die gewuenschte Manipulation ein!***
echo 00: Modul_generieren
echo 01: Modul_drehen
echo 11: CUT_Zugstab_Stahl
echo 12: CUT_Zugstab_Kunststoff
echo 14: CUT_Kugle
echo 15: CUT_Scherprobe
echo 21: Zugversuch
echo 23: Dampingversuch
echo 24: Scherversuch
echo '*****'
read aktion
case $aktion in
  00)
    echo Modul_generieren

    FILE="work/DEM.ini"
    modul="'sed -n 38p $FILE'"
    echo **Ausgewaeltes Modul: $modul
    cp work/module/$modul work/
    cd work/
    kraftzentren.prg 00
    mache_gifanim
    gifview film.gif
    rm dy*.dat
    rm movie.*.gif
```

```
rm fim.gif
;;
01)
echo ****Modul_drehen****
FILE="work/DEM.ini"
modul="'sed -n 38p $FILE'"
echo **Ausgewaeltes Modul: $modul
cp work/module/$modul work/
cd work/
kraftzentren.prg 01
rm $modul
mache_gifanim
gifview film.gif
rm dy*.dat
rm movie.*.gif
rm film.gif
;;
11)
echo ****CUT_Zugstab_Stahl****
FILE="work/DEM.ini"
modul="'sed -n 38p $FILE'"
echo **Ausgewaeltes Modul: $modul
cp work/module/$modul work/
cd work/
kraftzentren.prg 11
rm $modul
mache_gifanim
gifview film.gif &
rm dy*.dat
rm movie.*.gif
rm film.gif
;;
12)
echo ****CUT_Zugstab_Plaste****
FILE="work/DEM.ini"
modul="'sed -n 38p $FILE'"
echo **Ausgewaeltes Modul: $modul
cp work/module/$modul work/
cd work/
kraftzentren.prg 12
rm $modul
mache_gifanim
gifview film.gif &
rm dy*.dat
rm movie.*.gif
rm film.gif
;;
```



```
14)
    echo ****CUT_Kugel****
    FILE="work/DEM.ini"
    modul="'sed -n 38p $FILE'"
    echo **Ausgewaeltes Modul: $modul
    cp work/module/$modul work/
    cd work/
    kraftzentren.prg 14
    rm $modul
    mache_gifanim
    gifview film.gif &
    rm dy*.dat
    rm movie*.gif
    rm film.gif
    ;;
15)
    echo ****CUT_Scherprobe****
    FILE="work/DEM.ini"
    modul="'sed -n 38p $FILE'"
    echo **Ausgewaeltes Modul: $modul
    cp work/module/$modul work/
    cd work/
    kraftzentren.prg 15
    rm $modul
    mache_gifanim
    gifview film.gif &
    rm dy*.dat
    rm movie*.gif
    rm film.gif
    ;;
*****
21)
    echo ****Zugversuch****
    FILE="work/DEM.ini"
    modul="'sed -n 38p $FILE'"
    echo **Ausgewaeltes Modul: $modul

i=1
while [ -d work/zugversuche/versuch$i ]
do
    let i=i+1
done
    mkdir work/zugversuche/versuch$i
cp work/*.dat work/zugversuche/versuch$i/
cp work/*.ini work/zugversuche/versuch$i/
cp work/scatter5.prg work/zugversuche/versuch$i/
cp work/module/$modul work/zugversuche/versuch$i/
cd work/zugversuche/versuch$i
```

```
ln -s ../../../../kraftzentren.prg kraftzentren.prg
nohup kraftzentren.prg 21
rm $modul
gnuplot << EOF
set title "Kraft-Weg-Diagramm"
set terminal svg
set output "kraftweg.svg"
set xlabel "Weg [mm]"
set ylabel "Kraft [N]"
plot "kraft_weg" us 1:2 title "Sensor: Steg" with line, "kraft_weg" us 1:3 title "Sensor:Socket" with line
EOF
firefox kraftweg &
mache_gifanim
gifview film.gif &
;;
#####
23)
echo ****Dampingversuch****
FILE="work/DEM.ini"
modul="'sed -n 38p $FILE'"
echo **Ausgewaeltes Modul: $modul
i=1
while [ -d work/dampingversuche/versuch$i ]
do
let i=i+1
done
mkdir work/dampingversuche/versuch$i
cp work/*.dat work/dampingversuche/versuch$i/
cp work/*.ini work/dampingversuche/versuch$i/
cp work/scatter5.prg work/dampingversuche/versuch$i/
cp work/module/$modul work/dampingversuche/versuch$i/
cd work/dampingversuche/versuch$i
ln -s ../../../../kraftzentren.prg kraftzentren.prg
nohup kraftzentren.prg 23
rm $modul
gnuplot << EOF
set title "Weg-Zeit-Diagramm"
set terminal svg
set output "kraftzeit.svg"
set xlabel "Hoehe [mm]"
set ylabel "Zeit [s]"
plot "kraft_zeit" us 1:2 with line
EOF
firefox kraftzeit &
mache_gifanim
gifview film.gif &
;;
```

```
#####
24)
    echo ****Scherversuch****
    FILE="work/DEM.ini"
    modul="'sed -n 38p $FILE'"
    echo **Ausgewaeltes Modul: $modul

i=1
while [ -d work/scherversuche/versuch$i ]
do
    do
        let i=i+1
done
    mkdir work/scherversuche/versuch$i
cp work/*.dat work/scherversuche/versuch$i/
cp work/*.ini work/scherversuche/versuch$i/
cp work/scatter5.prg work/scherversuche/versuch$i/
cp work/module/$modul work/scherversuche/versuch$i/
cd work/scherversuche/versuch$i
ln -s ../../../../kraftzentren.prg kraftzentren.prg
nohup kraftzentren.prg 24
rm $modul
gnuplot << EOF
set title "Kraft-Weg-Diagramm"
set terminal svg
set output "kraftweg.svg"
set xlabel "Weg [mm]"
set ylabel "Kraft [N]"
plot "kraft_weg" us 1:2 title "Sensor: Steg" with line, "kraft_weg" us 1:3 title "Sensor:Socketel" with lin
EOF
firefox kraftweg &
mache_gifanim
gifview film.gif &
    ;;
#####
*)
    echo $aktion ist keine gueltige Eingabe.
    ;;
esac
```